

2 Die Klassifikation von Immissionsregimes

Immissionszeitreihen zeichnen sich durch große individuelle Unterschiede aus, die auf das herrschende Emissionsregime am Messort und in seiner Umgebung zurückzuführen sind. Die Zeitreihen variieren in klimatischer Hinsicht, was sich in den mittleren Werten und in unterschiedlicher Variabilität (z. B. Tagesgang) ausdrückt. Es ist sinnvoll, die Messstationen zu klassifizieren, um diese Unterschiede zu verdeutlichen.

Statistische Untersuchungen setzen häufig voraus, dass die Stichproben aus einer Grundgesamtheit²⁹ stammen. Durch die Klassifikation der Regimes kann diese Vorgabe besser erfüllt werden.

Das Konzept des Emissions-Immissionsregimes wird eng mit dem Problem der **räumlichen Repräsentativität** von Beobachtungen verbunden (siehe Exkurs 1.5). Im Rahmen der Arbeit wird die Klassifikation von Immissionsregimes verwendet, um die Techniken der Datenassimilation den Besonderheiten der Immissionsmessung anzupassen.

Bei jeder Klassifikation stellt sich die Frage nach einer problemorientierten und möglichst objektiven Definition der Klassengrenzen. Durch eine geeignete Wahl der betrachteten Parameter kann die Trennung verschiedener Klassen verschärft und durch mathematische Verfahren objektiviert werden. Es wird im Folgenden ein hierarchisches Clusterverfahren entwickelt, das eine möglichst objektive Klassifikation der vorliegenden Immissionszeitreihen für die Stoffe Ozon, NO, NO₂, SO₂ und PM10 erlaubt. Die Klassifikation erfolgt dabei auf Basis der in Kapitel 1.4.3 vorgestellten Parameter der Jahreszeitreihen. Dabei wird die Zugehörigkeit nicht nur kategorisch bestimmt, sondern auch mit Hilfe einer Metrik quantifiziert, um Übergänge besser zu erfassen.

2.1 Methodik der Klassifikation von Immissionsmessstationen

Die Klassifikation der Messstationen kann nach dem **Emissionsregime** oder dem **Immissionsregime** erfolgen. Die Kenntnis der Emissionsstruktur gibt wichtige Hinweise auf die zu erwartende Immissionssituation. Deswegen werden anschauliche Benennungen der Emissionsregimes (Berg, Land, Stadt, Straße etc.) auf die Immissionsregimes übertragen. Eine methodische Grenze zwischen den Regimes von Emission und Immission wird häufig nicht gezogen. Die alleinige Berücksichtigung der Emissionsstruktur ist jedoch nicht ausreichend, da Transportvorgänge und chemische Umwandlung von primären und sekundären Luftbeimengungen das Immissionsregime beeinflussen. Darüber hinaus ist eine quantitative Erfassung der Emissionen meist mit großen Unsicherheiten verbunden.

²⁹ Die z. B. durch den Erwartungswert sinnvoll charakterisiert ist.

Klassifikationen nach dem Emissionsregime sind selten automatisiert und beruhen auf der Expertise der Messnetzbetreiber. Sie stellen die Grundlage für die Begriffsbildung und die qualitative Beschreibung der Immissionssituation dar.

Die Zuordnung des Immissionsregimes für eine Messstation greift auf bereits gemessene Immissionswerte zurück. Sie hängt von dem betrachteten Stoff ab. So erlauben geringe NO_x -Immissionen nur in gewissem Umfang den Rückschluss auf eine geringe SO_2 -Immission. Erhöhte PM_{10} -Konzentrationen können z. B. auch jenseits der urbanen und industriellen Zentren durch windbedingte Staubaufwirbelung entstehen. Im Fall der fotochemisch gekoppelten Stoffe Ozon, NO_2 und NO ist jedoch eine hohe NO -Belastung mit geringer Ozonimmission verbunden.

Vorliegenden Klassifikationen des Immissionsregimes der Stationen in Deutschland (siehe Kapitel 2.2) beziehen sich nur auf die Ozonimmission (Enke et al., 1998 und Tilmes, 1999). Dies ist in der Tatsache begründet, dass Ozon seit drei Jahrzehnten im Mittelpunkt der Umweltbewertung und Forschung steht. Darüber hinaus ist die Ozonkonzentration mit der NO_x und VOC^{30} -Immission gekoppelt. Sie ist damit eine den luftchemischen Zustand zusammenfassende und gut messbare Größe.

Die Emissionen für SO_2 oder PM_{10} sind nur zum Teil an die Verkehrslage gebunden, daher empfiehlt sich für diese Stoffe eine gesonderte Nomenklatur.

Extrem gering oder stark belastete Stationen können meist gut identifiziert werden. Problematisch sind die urbanen Stationen und die Übergänge zu den ländlichen bzw. verkehrsbeeinflussten Regimes. Das Immissionsregime ist in vielen Fällen nicht konstant, sondern es wird durch die wechselnde Wettersituation bestimmt. Dies ist insbesondere für Vorstadt-Stationen gültig, die je nach Luv- oder Lee-Lage schwach oder stark von den emittierenden Ballungszentren beeinflusst werden. Es ist demzufolge zwischen dem mittleren oder klimatischen und dem konkreten Immissionsregime zu unterscheiden. Die in dieser Arbeit vorgestellte Klassifikation zielt auf das klimatische Immissionsregime.

2.2 Bisherige Klassifikationen der Immissionsregimes in Deutschland

Zum Beginn der Arbeit lagen folgende Ansätze zur Charakterisierung der Immissionsstationen in Deutschland vor:

- subjektive Charakterisierung des Emissionsregimes (**E-Typ**)
- UBA-Klassifikation mit Hilfe der Häufigkeitsverteilung der stündlichen Ozonmesswerte (Enke et al. (1998), **UBA-Typ**)
- Kategorisierung mit Hilfe eines Tagesgangindex der Ozonimmission nach Tilmes (1999), **Tilmes-Typ**).

Die vom Umweltbundesamt verwendete Klassifikation der Ozonstationen wurde von Enke et al. (1998) durchgeführt. Sie basiert auf Histogrammen der stündlichen Jahreszeitreihen für Ozon aus den Jahren 1990-96. Die gemessenen stündlichen Ozonkonzentrationen wurden in Wertebereiche von $30 \mu\text{g}/\text{m}^3$ Breite aufgeteilt. Die relative

³⁰ Volatile organic compounds, flüchtige Kohlenwasserstoffe

Häufigkeit des Auftretens der untersten vier Wertebereiche (d. h., 1-30, 31-60, 61-90, 91–120 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) in der Zeitreihe ist das Entscheidungskriterium für die Kategorisierung. Im Gegensatz zu Tilmes, der hauptsächlich den Tagesgang verwendet, stehen hier die Minimalkonzentrationen des Ozons im Vordergrund. Die Abgrenzung der Immissionstypen (Ozon) wurde subjektiv festgelegt, da sich eindeutige Trennkriterien aus der verwendeten Methode nicht direkt ergaben.

Tilmes (1999) klassifiziert die Stationen in 5 Klassen (siehe Tabelle 3) mit Hilfe eines Index, der auf dem Verhältnis des Tagesganges zum Tagesmittelwert beruht. Er gewinnt den Tagesgang durch die Amplitude des ersten Eigenvektors einer PCA³¹ der Ozonmessreihen. Die Länge der verwendeten Zeitreihen (3 Monate im Sommer 1994) ist nach seiner Einschätzung verhältnismäßig kurz. Die Klasseneinteilung nach diesem Indexwert erfolgt mit einer „Eichung“ durch typische Vertreter einer anderen Klassifizierung, die auf dem prozentualen Anteil niedriger Werte und der Form des Histogramms der gesamten Zeitreihe beruht. Im Vergleich zur UBA-Klassifikation beruht seine Klassifikation in höherem Maße auf dem Tagesgang; typische Werte finden nur geringen Einfluss.

Reimer et al. (1997) klassifizieren die Stationen in Sachsen und berücksichtigen dabei explizit die veränderliche meteorologische Situation. Sie weisen darauf hin, dass der Wochengang³² an strahlungsreichen Tagen für eine gute Abgrenzung zwischen Vorstadt- und Land-Stationen verwendet werden kann.

2.2.1 Vergleich der verschiedenen Klassifikationen

Die Charakterisierung der Emission (E-Typ) unterscheidet die drei Emissionsregime „Land“ (R), „Stadt“ (U) und „Straße“ (S). Sie beruht auf einer Einschätzung der lokalen Emissionsstruktur der zuständigen Messnetzbetreiber. Die Kategorisierung nach Enke (UBA-Typ) fügt den drei erwähnten Typen noch den Typ „Berg“ (B) hinzu. Tilmes führt weiterhin die Klasse der Vorstadt-Stationen ein.

Tabelle 2 ermöglicht eine Gegenüberstellung der Klassifikation nach dem Emissionsregime (E-Typ) und dem Immissionsregime nach dem UBA-Typ. Die Unterschiede sind hinsichtlich der Stationen des Typs „Straße“ am größten. Ungefähr zwei Drittel der Stationen dieses Typs werden nach der jeweils anderen Klassifikation dem urbanen Regime zugeordnet. Die Hälfte der Land-Stationen nach dem Emissionsregime (E-Typ) wird als urbane Station hinsichtlich der Ozonimmission (UBA-Typ) klassifiziert. Im umgekehrten Fall trifft dies nur auf wenige Stationen zu. Die große Anzahl der urbanen Stationen wird von beiden Klassifikationen in gleicher Weise charakterisiert.

Tabelle 3 vergleicht die Klassifikation nach dem UBA-Typ mit den Regimes nach Tilmes (Tilmes-Typ). Der auffälligste Unterschied ist der hohe Anteil der stark verkehrsbeeinflussten Stationen („Verkehr“) bei Tilmes. Knapp die Hälfte aller Stationen werden diesem Regime zugeordnet. Alle Stationen des Regimes „Straße“ (UBA-Typ) und die Hälfte der Stationen des urbanen Regimes (UBA-Typ) gehören dem direkt verkehrsbeeinflussten Stationstyp nach Tilmes an. Die urbanen Stationen nach Tilmes sind auch urbane Stationen nach dem UBA-Typ. Die Klasse der suburbanen Stationen nach Tilmes setzt sich zu einem Drittel aus Land-Stationen und zu zwei Dritteln aus urbanen Stationen nach dem UBA-Typ zusammen. Dadurch ist die Menge der ländli-

³¹ Principal component analysis

³² hier die Differenz zwischen Freitag und Sonnabend

chen Stationen bei Tilmes um ein Drittel geringer als bei dem UBA-Typ. Die Berg-Stationen beider Klassifikationen stimmen überein, Tilmes gliedert noch die Station Zinnwald (SN052, 877m NN) in diese Klasse ein.

Beide Klassifikationen kommen hinsichtlich der Zunahme des Kriteriums für die Unterscheidung der Regimes zu einem ähnlichen Ergebnis. Unterschiedlich ist jedoch die Festlegung der Grenzen, so dass Tilmes' Klassifikation einen sehr hohen Anteil von Straßen-Stationen identifiziert, die nicht weiter in unterschiedliche Belastungsstufen aufgeteilt werden. Weiterhin ist seine Gruppe der Land-Stationen zahlenmäßig klein und viele Stationen des ländlichen Regimes werden dem suburbanen Regime zugeordnet.

		UBA-Typ					
E-Typ		Kein	B	R	U	S	Total
	Kein		0	12	11	0	23
	R	17	8	46	22	1	94
	U	27	0	7	148	41	223
	S	5	0	0	38	16	59
	Total	49	8	65	219	58	399

Tabelle 2 Kontingenztafel der verbundenen Häufigkeit der Emissions/Immissions-Regimes nach E-Typ (Emission) und UBA-Typ (O₃ Immission), Land = R, Stadt = U, Verkehr = S und Berg = B.

		UBA-Typ					
Tilmes-Typ		Keine	B	R	U	S	Total
	Berg	0	8	1	0	0	9
	Land	4	0	32	0	0	36
	Suburban	10	0	26	43	0	79
	Urban	5	0	4	62	0	71
	Verkehr	8	0	1	109	55	173
Total	27	8	64	214	55	368	

Tabelle 3 Kontingenztafel der verbundenen Häufigkeit der Immissionsregimes nach UBA-Typ und nach Tilmes (Beschreibung siehe Tabelle 2)

2.2.2 Notwendigkeit einer neuen Klassifikation

Der Vergleich der Klassifikationen macht deutlich, dass die verschiedenen Ansätze zu verschiedenen Ergebnissen kommen. Es kann jedoch keine erkennbare Überlegenheit eines Ansatzes ermittelt werden. Für die UBA-Klassifikation spricht ihr offizieller Charakter und dass sie die Vorstellung der Regimes durch längeren Gebrauch geprägt hat.

Es stellte sich im Verlauf der Arbeit heraus, dass die vorliegende UBA-Klassifikation der deutschen Messstationen für die gestellten Aufgaben unzureichend ist. Deshalb wurde ein eigenständiger Klassifikationsansatz unternommen. Die Gründe hierfür sind im einzelnen:

- Die UBA-Klassifikation beruht nur auf Ozonmessungen – andere Stoffe werden nicht berücksichtigt.

- Es liegt nur für ca. 50% der 675 verwendeten Stationen eine Klassifikation vor. Dies gilt insbesondere für deutsche Stationen ohne Ozonmessungen und internationale Stationen.
- Die UBA-Klassifikation berücksichtigt wichtige Informationen über die Tageschwankung nicht.
- Die UBA-Klassifikation berücksichtigt nur Daten bis 1996 und entspricht damit u.U. nicht mehr den heutigen Immissionsverhältnissen.
- Die Abgrenzung der einzelnen Klassen erfordert eine Überprüfung bzw. eine genauere Unterteilung.
- Eine Methode zur Klassifizierung von Jahreszeitreihen aus Modellrechnungen soll geschaffen werden.

Eine neue Klassifikation aller vorliegenden Messreihen wurde mit Hilfe des in Kapitel 2.3 beschriebenen Clusterverfahrens unternommen. Das Verfahren beruht auf einer Auswahl der statistischen Parameter der einzelnen Jahreszeitreihen. Die offizielle Klassifikation des UBA dient der neuen Klassifizierung zur Überprüfung und als Referenz.

2.3 Ein Clusterverfahren zur Kategorisierung des Immissionsregimes

2.3.1 Clusterverfahren

Ziel der Clusterung ist die Identifizierung von Gruppen aus ähnlichen Objekten. Das Objekt ist durch eine Anzahl von quantitativen³³ Angaben (Variablen) gekennzeichnet, die für verschiedene Objekte verschiedene Werte annehmen.

Die Ähnlichkeit zwischen den Objekten wird mit Hilfe einer zu definierenden Metrik in Form eines Abstandes ausgedrückt. Sehr häufig bedient man sich dabei einer euklidischen Metrik³⁴. Die Objekte werden damit zu Punkten in einem euklidischen Raum³⁵, dessen Koordinaten die Variablen des Objektes sind. Die „Ähnlichkeit“ wird damit über die reziproken Abstände der Datenpunkte definiert.

Mit der Metrik werden die Unterschiede hinsichtlich verschiedener Variablen zu einem Wert zusammengefasst. Der gleiche Abstand zwischen zwei Objekten kann demzufolge durch Differenzen in unterschiedlichen Objektvariablen entstehen. Aus diesem Grund ist die Skalierung der Variablen von großer Bedeutung. Sie bestimmt den Einfluss, den die Unterschiede in einer Variablen, d. h. hinsichtlich einer der Achsen des euklidischen Koordinatensystems, auf die Ähnlichkeit der Objekte haben. Neben der Objektmetrik muss definiert werden, wie die Ähnlichkeit von Clustern bestimmt wird.

Die Anzahl der gebildeten Cluster ergibt sich nicht direkt aus dem Clusterverfahren, sondern muss in Abhängigkeit von der Problemstellung vorgegeben bzw. aus dem Verlauf des Clusterprozesses abgeleitet werden.

³³ Es existieren auch Clusterverfahren für qualitative Variablen.

³⁴ Ein nichteuklidisches Abstandsmaß wäre z. B. die Korrelation der beiden Zustandsvektoren.

³⁵ Im zweidimensionalen Fall ergibt sich ein Streudiagramm.

Eine zusammenfassende Darstellung der statistischen Clusterverfahren für meteorologische Anwendungen ist z. B. in Wilks (1995) zu finden. Einen Vergleich verschiedener Clusterverfahren für klimatologische Anwendungen liefert Kalkstein et al. (1987). Bacher (1994) und Romesburg (1984) geben umfassende Gesamtdarstellungen der Clusteranalyse.

2.3.1.1 Hierarchische Clusterbildung

Die **hierarchischen Clusterverfahren** betrachten zunächst jedes der N zur Clusterung bestimmten Objekte als ein eigenständiges Cluster. Schrittweise werden die zwei ähnlichsten Cluster, d. h. die Cluster mit dem geringsten Abstand zueinander, zu einem neuen Cluster vereinigt, so dass nach N Wiederholungen alle Datenpunkte in einem Cluster vereint wären. Der Vereinigungsprozess wird nach dem $(N-X)$ -ten Schritt beendet, um die Datenpunkte in X Clustern zusammenzufassen. Bei den hierarchischen Verfahren besteht demzufolge die Möglichkeit, die Zusammensetzung des Clusters aus untergeordneten Clustern nachzuvollziehen. Der Abstand zwischen Clustern, die aus mehreren Objekten bestehen, hängt von der gewählten Clusterbildungsmethode ab (siehe Kapitel 2.3.1.2). Sie bestimmt wesentlich die Form der gebildeten Cluster.

Die Funktionsweise der hierarchischen Clusterung wird in dem Dendrogramm deutlich (Abbildung 2.1). Es zeigt, wie die einzelnen Objekte kontinuierlich zu einem einzigen Cluster vereint werden. Der überwundene Abstand (X -Achse) wird mit abnehmender Anzahl der Cluster größer.

Die Größe des bei jedem Vereinigungsschritt überwundenen Abstandes kann als Hilfsmittel für die Bestimmung einer optimalen Anzahl von Clustern verwendet werden. Ein starkes Anwachsen des zu überbrückenden Abstandes bei einem bestimmten Schritt ist ein Indiz dafür, dass nun Cluster vereinigt werden, die große Unterschiede aufweisen und somit besser getrennt blieben.

Neben den hierarchischen Verfahren gibt es nichthierarchische iterative Methoden, die nach Vorgabe einer Anzahl von Clustern, die Datenpunkte so ordnen, dass die Varianz innerhalb der Cluster minimiert wird. Sie verlangen eine geschätzte Angabe für jedes Clusterzentrum als Startpunkt der Iteration.

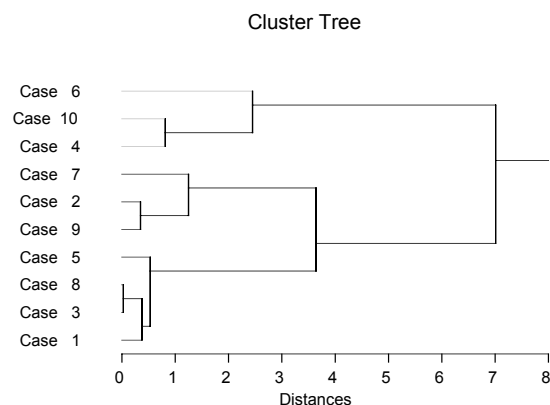


Abbildung 2.1 Dendrogramm eines hierarchischen Clusterprozesses: Links sind alle 10 Datenpunkte ein separates Cluster, die in Abhängigkeit des Abstandes (x -Achse) schrittweise zu einem Cluster zusammengefasst werden.

2.3.1.2 Clusterbildungsmethode

Die Clusterbildungsmethode³⁶ legt fest, wie der Abstand bzw. die Ähnlichkeit zwischen zwei Clustern definiert wird, die aus mehreren Objekten zusammengesetzt sind. Es wird dabei auf die Metrik zwischen den Objekten zurückgegriffen. Die Wahl der Clusterbildungsmethode ist von entscheidender Bedeutung für die Form der gebildeten Cluster (Kalkstein et al., 1987). Fünf häufig verwendete Clusterbildungsmethoden werden kurz vorgestellt. Ihre Berechnung erfolgte mit der Fortran-Programmibibliothek ISML. Die unterschiedliche Zusammensetzung der mit diesen Methoden gebildeten Cluster ist beispielhaft in Abbildung 2.2 dargestellt.

- SINGLE: verwendet den Abstand zwischen den beiden nächsten Datenpunkten der beiden Cluster (erzeugt langgestreckte Cluster)
- COMPLETE: verwendet den Abstand zwischen den beiden entferntesten Datenpunkten der beiden Cluster (erzeugt kompakte Cluster)
- CENTEROID: verwendet den Abstand zwischen den beiden Clusterzentren (erzeugt große kompakte Cluster mit einer Tendenz zur Separierung von „Ausreißern“)
- AVERAGE: verwendet den Mittelwert aller möglichen Abstände zwischen den Datenpunkten der beiden Cluster (erzeugt kompakte Cluster)
- WARD: verwendet die Zunahme der Summe der quadratischen Abstände innerhalb des Clusters, falls die zwei Cluster zu einem vereint werden (erzeugt kompakte Cluster)

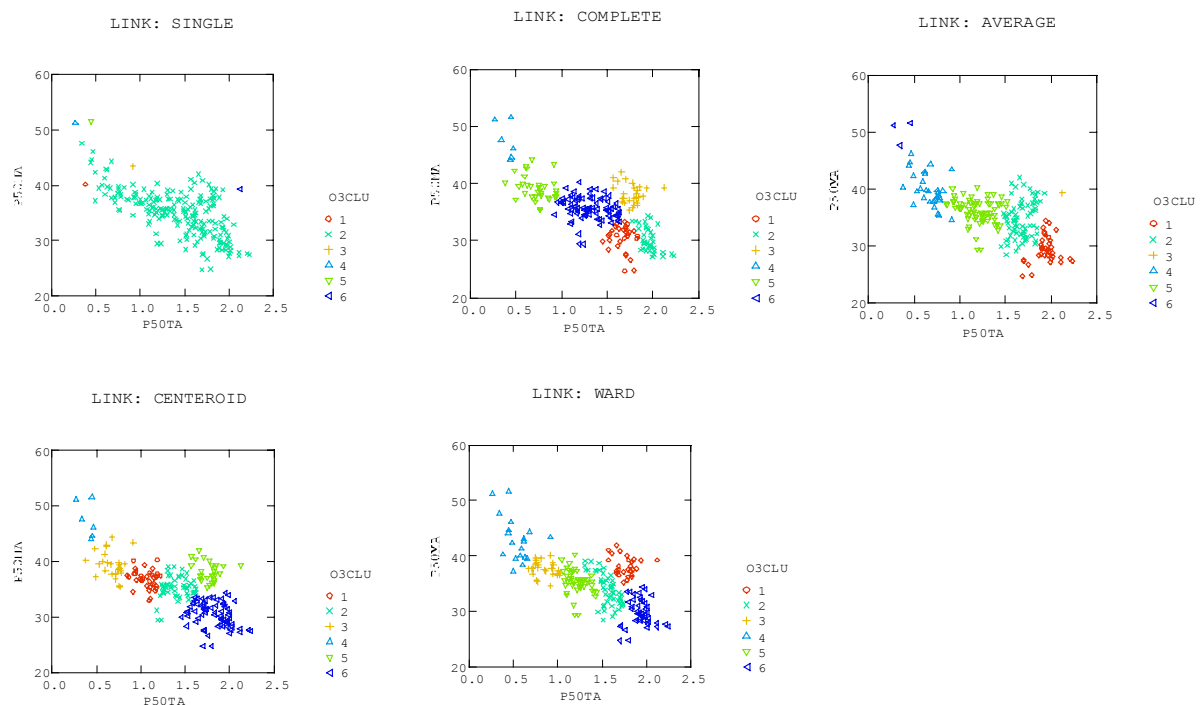


Abbildung 2.2 Beispiel der hierarchischen Clusterung eines Ensembles in 6 Clustern mit verschiedenen Clusterbildungsmethoden.

³⁶ Dies ist gewissermaßen eine Metrik zwischen den Clustern.

2.3.1.3 Zugehörigkeitsfunktion und deren nachträgliche Bestimmung

Objekte aus atmosphärischen Daten sind meist kontinuierlich im Variablenraum verteilt. Die ermittelten Cluster können dadurch eine Trennung ähnlicher Objekte hervorrufen. Deswegen ist es sinnvoll, die kategorische Information der Clustereinteilung mit einer quantitativen Angabe³⁷ über den Grad der Zugehörigkeit des Objekts zum Cluster zu erweitern. Dafür wird der Vektor der Abstände (inverse Zugehörigkeit) des Objektes zu den einzelnen Clustern gebildet. Der geringste dieser Abstände gibt die Zugehörigkeit zu dem entsprechenden Cluster an. Der Vergleich mit den anderen Abständen ergibt, ob es sich um einen „typischen“ Vertreter oder einen im Übergangsbereich zweier Cluster handelt.

Der Clusterschwerpunkt bzw. das Clusterzentrum bietet eine Möglichkeit, die gebildeten Cluster vereinfacht zu beschreiben. Im Fall einer euklidischen Metrik ist das Clusterzentrum ein Objekt aus den Mittelwerten der Variablen aller Objekte des entsprechenden Clusters.

Auf Basis der Clusterzentren können nun nicht in den Clusterprozess einbezogene Datenpunkte klassifiziert werden. Die Abstände des Datenpunktes zu den Clusterzentren bilden den Zugehörigkeitsvektor, aus dem das gesuchte Cluster ermittelt wird (siehe Abbildung 2.3). Die Abstandsbestimmung bei diesem Vorgehen entspricht der Clusterbildungsmethode Centroid. Sie ist für die nachträgliche Klassifizierung auch anwendbar, wenn das Clusterverfahren auf „mittelwertzentrierten“ Clusterbildungsmethoden wie Average und WARD beruht, da eines der vereinten Cluster nur aus einem Objekt besteht.

Im Gegensatz zum hierarchischen Clusterprozess erfolgt die nachträgliche Einordnung ohne eine Veränderung des bereits vorgegebenen Clusters. Dieser Umstand ist bei den folgenden Anwendungen dieser Clustereinordnung von Vorteil:

- Unerwünschte „Ausreißer“ können aus dem hierarchischen Clusterprozess ausgeschlossen und erst nachträglich einem Cluster zugeordnet werden.
- Unabhängige Datenpunkte (z. B. die Parameter aus Immissionszeitreihen der Modellrechnungen) können nach den Vorgaben aus der Gesamtheit der geclusterten Daten (z. B. die Messwerte) klassifiziert werden.
- Für Stabilitätsuntersuchungen können verschiedene Clusterergebnisse anhand der gewonnenen Clusterzentren verglichen werden.

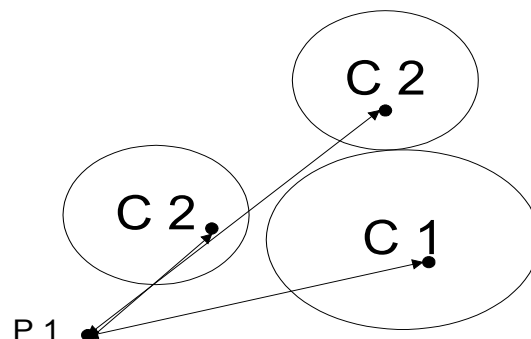


Abbildung 2.3 Nachträgliche Einordnung des Datenpunktes P1 in das Cluster C 2 aufgrund des geringsten Abstandes zum Clusterzentrum

³⁷ in Anlehnung an die Fuzzy-Logik

2.3.2 Strategie der Clusterung von Parametern der Immission

Ziel des Clusterverfahrens ist es, die Gesamtheit der vorliegenden Jahreszeitreihen aus Deutschland in Gruppen zu ordnen, die als Immissionsregimes interpretiert werden können. Die Zeitreihe wird dabei mit Hilfe einer Auswahl der statistischen Parameter aus Kapitel 1.4.3 zu einem Objekt zusammengefasst.

Die Durchführung der hierarchischen Clusterung erfordert die Festlegung der folgenden Verfahrenskenngrößen:

- Auswahl der Objektvariablen (Parameter der Immissionszeitreihe)
- Anzahl der zu bildenden Cluster
- Skalierung und Transformation der Parameter
- Wahl der Clusterbildungsmethode

Die Verfahrenskenngrößen sind so zu wählen, dass sie den Absichten und Anforderungen der Anwendung entsprechen. Zu diesem Zweck werden die folgenden Zielvorstellungen formuliert:

- **Plausibilität:** Das Ergebnis ist interpretierbar und bereits vorhandene Klassifikationen spiegeln sich in dem Ergebnis wider³⁸.
- **Stabilität:** Das Ergebnis der Clusterung gilt auch für Teilmengen der Grundgesamtheit bzw. Variationen in der Clusterbildungsmethode.
- **Homogenität:** Die Anzahl der Stationen pro Cluster ist möglichst ausgeglichen und liefert eine sinnvolle Trennung („Ausreißer“-Problematik).

Abbildung 2.4 präsentiert eine schematische Darstellung der Vorgehensweise bei der Festlegung der Verfahrensparameter. Die mehr „inhaltlichen“ Verfahrenskenngrößen (Wahl der Objektvariablen und der Clusteranzahl) werden vor der Clusterung mit Hinblick auf die Problemstellung festgelegt. Die „technischen“ Verfahrensparameter (Skalierung und Transformation, Wahl der Clustermetrik) werden in einem quasi-iterativen Vorgehen bestimmt. Dazu werden verschiedene Kombinationen der Verfahrenskenngrößen auf die Stabilität und Homogenität der gebildeten Cluster getestet und die in diesem Sinne beste Kombination ausgewählt. Die gewonnene Skalierung bestimmt dabei in hohem Maße die Bewertung der Klassifikation, denn sie legt fest, welche Kriterien für eine sinnvolle Unterscheidung der Regimes besonders verwendbar sind. So stellte sich heraus, dass für NO, NO₂, SO₂ und PM10 nur die mittlere Belastung und für Ozon zusätzlich die normierte Tagesschwankung das stabile Unterscheidungskriterium darstellt.

Die genaue Diskussion der Zielvorstellungen und die Wahl der Verfahrenskenngrößen sind der Inhalt der Kapitel 2.3.2.1 bis 2.3.2.5. Im Folgenden wird stichpunktartig die Vorgehensweise bei der Clusterung der Immissionszeitreihen vorgestellt:

- Die Immissionsregimes (Cluster) werden separat (univariat) für jeden Stoff mit den Daten der Jahre 1995-2001 bestimmt.
- Jede verfügbare und zu 85% vollständige Jahreszeitreihe wird als ein eigenständiges Objekt repräsentiert.

³⁸ z. B. die hinsichtlich eines anderen Stoffs

- Die mittlere Immission (P50ME) und die Tagesschwankung (P50TA) sind die Objektvariablen, die mit ihrem Quartilbereich normiert werden.
- Es werden sechs Immissionsregimes für NO, NO₂ und Ozon sowie fünf für SO₂ und PM10 ermittelt (siehe Tabelle 4).
- Datenpunkte, die Cluster mit weniger als 30 Elementen bilden („Ausreißer“), werden zunächst aus dem Ensemble entfernt und erst nachträglich mit Hilfe der Zugehörigkeitsfunktion klassifiziert.
- Stabilität und Homogenität werden anhand von 100 zufällig ausgewählten Teilensembles der halben Größe getestet.
- Aus verschiedenen Kombinationen von Clusterbildungsmethode, Skalierungen und Transformation wird die stabilste und homogenste ausgewählt.
- Nach der Clusterung aller Zeitreihen werden die Zentren der Cluster für den gesamten Zeitraum und für die einzelnen Jahre bestimmt.
- Die endgültige Klassifikation aller Zeitreihen erfolgt über die Zugehörigkeitsfunktion (siehe Kapitel 2.3.1.3) hinsichtlich der jahresbezogenen Clusterzentren.
- Die Klassenzugehörigkeit für den gesamten Zeitraum ergibt sich aus dem Mittelwert der Abstände zu den Clusterzentren des gesamten Zeitraums.

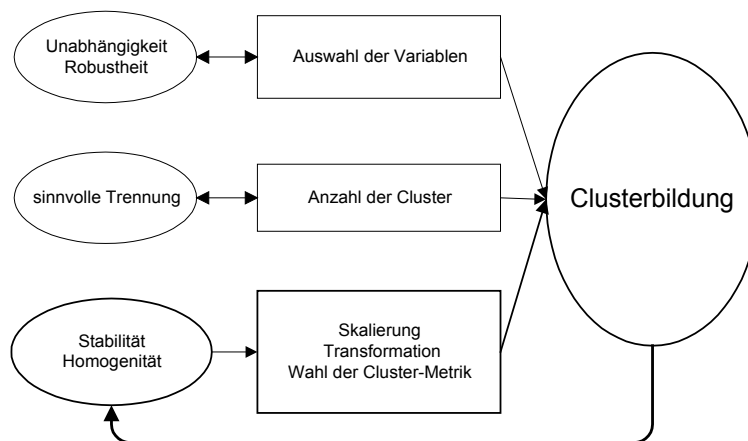


Abbildung 2.4 Schematischer Ablaufplan der Vorgehensweise bei der Clusterung der Immissionsparameter

2.3.2.1 Definition der Objekte und Auswahl der Variablen

Die Definition der Objekte und die Auswahl der sie charakterisierenden Variablen ist die wichtigste inhaltliche Fragestellung bei der Klassifikation der Immissionsregimes. Für die Klassifikation wurde jede Jahreszeitreihe der Immission eines Stoffs als ein eigenständiges Objekt aufgefasst. In Punkt 1 (siehe unten) wird eine Begründung gegeben, warum kein multivariater³⁹ Ansatz für die Definition der Objekte verwendet wurde. Die sinnvolle Wahl der die Jahreszeitreihe beschreibenden Kriterien, z. B. Maxima oder mittlere Werte, ist für die Interpretation der Regimes entscheidend. Von den kli-

³⁹ Ein Ansatz, bei dem die Objekte Informationen über verschiedene Stoffe vereinen

meteorologischen Parametern aus Kapitel 1.4.3. wurden die beiden folgenden für die Klassifikation ausgewählt:

- Median des Tagesmittelwerts P50ME als Maß für die mittlere Immission
- Median der normierten Tagesschwankung P50TA als Maß für die Tagesschwankung.

Eine genauere Diskussion dieser Wahl ist in Punkt 2. (siehe unten) zu finden. Welches der beiden Kriterien für die Klassifikation eine größere Bedeutung hat, wird jedoch erst mit der Skalierung (Kapitel 2.3.2.3) aufgrund des Tests von Stabilität und Homogenität (siehe 2.3.2.4) bestimmt.

1. Univariat oder multivariat

Zunächst bietet es sich an, jede Messstation als ein Objekt aufzufassen. Für jede Messstation können jedoch 6 Jahreszeitreihen (1994-99) für 5 Stoffe vorliegen. In der folgenden Diskussion wird ausgeführt, warum es sich als günstig erweist, jede Jahreszeitreihe der Immission eines Stoffs als eigenständiges Objekt aufzufassen. Dadurch wird jede Messstation durch mehrere Objekte repräsentiert.

Ein methodischer Nachteil des multivariaten Ansatzes ist der Umstand, dass Unterschiede in der Immission verschiedener Stoffe über den Abstand aufgerechnet werden und die gewonnenen Cluster schwerer interpretierbar sind. Der wichtigste Einwand gegen den multivariaten Ansatz ergibt sich jedoch aus der Datenlage, da nur für eine geringe Anzahl von Stationen vollständige Zeitreihen für alle Jahre und Stoffe vorliegen. Aus diesen Gründen wird die Clusterung **univariat**, d. h. separat für Ozon, PM10, SO₂, NO und NO₂ durchgeführt.

Aufgrund von verschiedenen Jahresklimaten oder einer Emissionsveränderung variieren die stoffbezogenen statistischen Parameter für eine Messstation von Jahr zu Jahr. Damit entsteht das Problem, dass für jedes Jahr ein unterschiedliches Immissionsregime ermittelt werden kann. Eine Vereinigung mehrerer Jahresparameter im Objekt oder die Zusammenfassung dieser Parameter zu einem Wert pro Station kann nicht vorgenommen werden, da für viele Stationen keine vollständigen Zeitreihen für alle Jahre vorliegen⁴⁰ (siehe Tabelle 1). Darüber hinaus würde durch dieses Vorgehen die Gesamtheit des Bereiches möglicher Parameterwerte eingeschränkt werden.

2. Auswahl der Klassifikationsmerkmale

Die Maximalwerte der Belastung hängen stark von der meteorologischen Situation ab, Minimalwerte (5%-Perzentil) liegen besonders bei NO häufig im Bereich der unteren Messbereichsschwelle und sind deswegen nicht aussagekräftig. Aus diesen Gründen werden nur die Mediane der Zeitreihen der täglichen Mittelwerte (P50ME), Maxima (P50MA), Minima (P50MI) und der normierten Tagesschwankung (P50TA) als mögliche Kandidaten für die Objektvariablen betrachtet.

Für die sinnvolle Parameterauswahl ist es wichtig, dass es sich um möglichst unabhängige Variablen handelt, da linear abhängige Variablen keine zusätzliche Information liefern. Um die Unabhängigkeit der Parameter zu überprüfen, werden die linearen Korrelationskoeffizienten bestimmt. Dabei stellt sich heraus, dass für alle betrachteten Stoffe eine hohe Korrelation zwischen den Medianen⁴¹ von Tagesmittelwert, -

⁴⁰ z. B. für PM10/TSP nur 11 Stationen.

⁴¹ Dies gilt auch für log-transformierte Größen.

maximum und -minimum und eine geringe Korrelation zur Tagesschwankung⁴² existiert. Die Tagesschwankung setzt sich aus dem Tagesmaximum und Minimum zusammen, so dass implizit auch diese Größen Beachtung finden. Die geringste Korrelation besteht zwischen den Medianen des Tagesmittelwertes und der normierten Tagesschwankung.

2.3.2.2 Anzahl der Cluster bzw. der Regimes

Die Anzahl der Cluster ist kein Ergebnis des Clusterverfahrens. Eine formal günstige Clusteranzahl kann aus dem bei jedem Clusterschritt überwundenen Abstand gefunden werden (Bacher, 1994). Wenn dieser sprunghaft ansteigt, werden sehr unterschiedliche Cluster vereinigt. Abbildung 2.5 zeigt beispielhaft diese Abstände für jeden der Stoffe. Es ist ersichtlich, dass jeweils 4 bis 6 Cluster eine formal günstige Trennung darstellen. Die Clusteranzahl wurde jedoch auch aus anwendungsbezogenen Überlegungen vor dem Clusterprozess festgelegt. Für die Ozonimmission bestand die Absicht, die vier Klassen in der UBA-Ozonklassifikation auf die sechs Immissionsregimes „Berg“, „Land“, „Vorstadt“, „Stadt“, „belastete Stadt“ und „Straße“ zu erweitern. Da NO und NO₂ eng mit der Ozonimmission verbunden sind, wird für diese Stoffe eine Einteilung in die gleichen Klassen mit Ausnahme der im NO_x-Regime nicht erkennbaren Berg-Stationen angestrebt. Es zeigt sich jedoch, dass an vielen NO_x-Stationen keine Ozonmessungen erfolgen bzw. keine vollständigen Zeitreihen vorliegen. Es handelt sich dabei meist um Messungen, die eine sehr hohe Immission aufweisen. Aus diesem Grund wird bei der NO_x-Immission ein zusätzliches Regime der extrem hohen Belastungen als „Straße, extrem“ identifiziert.

Bei SO₂ und PM10/TSP ist die Datenlage uneinheitlicher und eine so feine Aufteilung wie bei Ozon und NO_x scheint nicht möglich. Es werden jedoch 5 Klassen ermittelt, um der starken Veränderung der Immissionssituation in den verschiedenen Jahren gerecht zu werden (siehe Kapitel 3.9.2). Dadurch können die historischen, sehr hohen mittleren Immissionswerte eigenständige Cluster bilden und die Situation in der Gegenwart ist noch ausreichend differenziert beschrieben.

Die Tabelle 4 zeigt die ermittelten Regimes und vergleicht sie mit denen der UBA-Klassifikation (Enke et al., 1998) und jene von Tilmes (1999) (siehe Kapitel 2.2)

		0	1	2	3	4	5	6
Typ	Kriterium:	Berg	Land	Vorstadt	Stadt	belastete Stadt	Straße	Straße extrem
Cluster Ozon	Mittlere Immission Tagesschwankung	B	R	U1	U2	U3	S	
Cluster NO NO ₂	Mittlere Immission	R		U1	U2	U3	S	S2
Cluster PM SO ₂	Mittlere Immission	-	1	2	3	4	5	-
UBA Ozon	Minimalwerte	B	R	U			S	
Tilmes Ozon	Tagesgang	B	R	SU	U		S	

Tabelle 4 Gegenüberstellung verschiedener Klassifikationen der Immissionsregimes

⁴² Für Ozon existiert eine hohe negative Korrelation zwischen Tagesgang und Tagesmittelwert

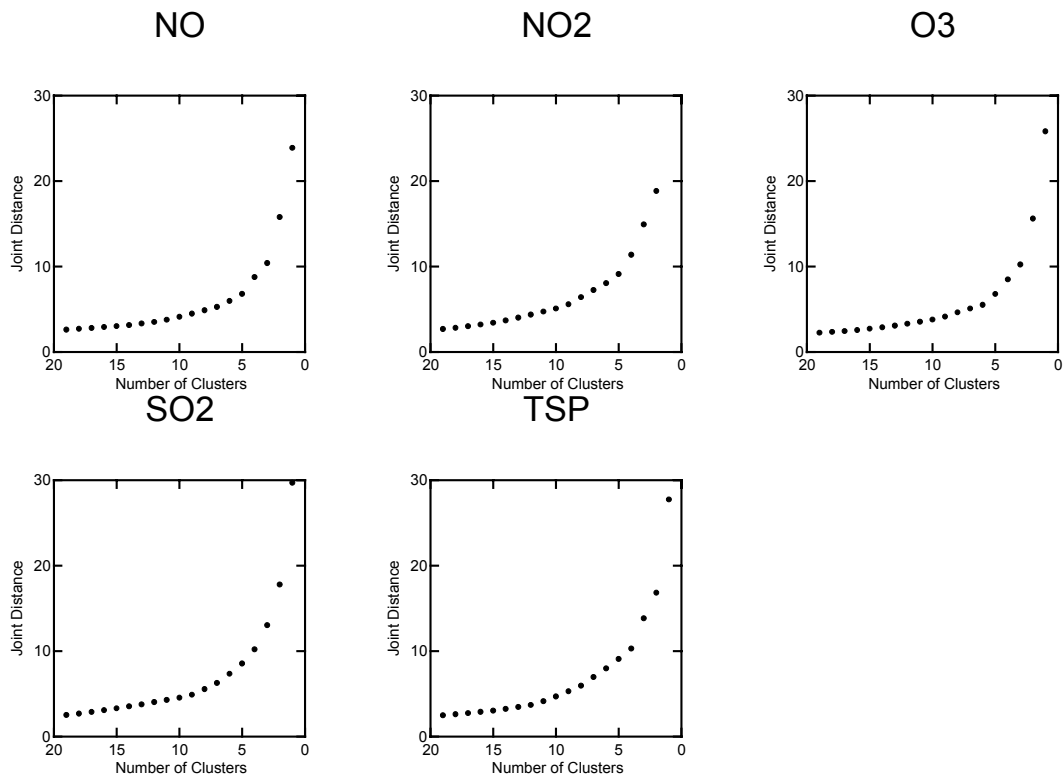


Abbildung 2.5 Der bei der Clustervereinigung überwundene Abstand (y-Achse) in Abhängigkeit von der Anzahl der gewonnenen Cluster (x-Achse).

2.3.2.3 Skalierung, Transformation und Clusterbildungsmethode

Normierung und Skalierung wichten den Einfluss der Variablen auf den Abstand. Sie gleichen einer Streckung einer der Achsen des Raums der Objektvariablen. Die Normierung erfolgt, um die unterschiedlichen Wertebereiche der Parameter vergleichbar zu machen. Für diesen Zweck wird in dieser Arbeit der Quartilbereich⁴³ verwendet. Darüber hinaus können die normierten Parameter skaliert werden, um einem Parameter eine besondere Bedeutung für die Abstandsbildung zuzuweisen.

Mit Hilfe einer Transformation können bestimmte Wertebereiche verändert gewichtet werden. So kommen mit der logarithmischen Transformation Unterschiede im Bereich der geringen Werte stärker zur Geltung. Dies ist insbesondere dann günstig, wenn Variablen eine stark unsymmetrische Verteilung zugunsten der niedrigen Werte aufweisen, wie z. B. die NO-Immission⁴⁴.

Neben Skalierung und Transformation hat insbesondere die Wahl der Clusterbildungsmethode großen Einfluss auf die Form der gebildeten Cluster (siehe Kapitel 2.3.1.2). Um die Clusterbildung der nachträglichen Klassifizierung (siehe Kapitel 2.3.1.3) anzupassen, muss die Clusterbildungsmethode CENTEROID gewählt werden⁴⁵. Die inner-

⁴³ Differenz zwischen 75%- und 25%-Perzentil

⁴⁴ Der Unterschied im NO-Tagesmittel zwischen 0 und 10 ppb weist auf einen deutlicheren Unterschied im Immissionsregime hin, als der zwischen 60 und 70 ppb.

⁴⁵ Sie neigt jedoch zur Bildung von wenigen großen und vielen kleinen Clustern (Kalkstein et al., 1987).

halb der Cluster varianzminimierende Metrik WARD erzeugt besonders kompakte Cluster und wird für viele meteorologische Anwendungen benutzt (Kalkstein et al., 1987). Aus diesem Grund wurde auch sie getestet.

Da es keine zwingende und objektive Begründung für die Wahl von Skalierung, Transformation und Clusterbildungsmethode gibt, werden diese variiert, um ein möglichst stabiles Clusterergebnis zu finden (siehe 2.3.2.4). Mit diesem Ansatz kann untersucht werden, welcher Parameter besonders für eine stabile Trennung der Immissionsregimes taugt. So ist z. B. für Ozon die normierte Tagesschwankung wichtig, während sie bei SO₂ keine Bedeutung hat. Die Parameterauswahl (siehe Kapitel 2.3.2.1) wird demzufolge durch die Skalierung verfeinert.

2.3.2.4 Test von Stabilität und Homogenität

Folgende Kombinationsmöglichkeiten der Verfahrenskenngrößen wurden auf Homogenität und Stabilität getestet:

- Skalierung des mit dem Quartilabstand normierten Parameters von 0.01 bis 1.0
- Logarithmische-Transformation (Ja/Nein) des Medians des Tagesmittelwertes
- Clustermetrik WARD und CENTEROID

Stabilitätsuntersuchungen sollen feststellen, ob die gebildeten Cluster sinnvolle Strukturen wiedergeben oder Artefakte der Daten und des Verfahrens sind. Im stabilen Fall führt auch eine zufällig ausgewählte und genügend große Teilmenge zum einem sehr ähnlichen Ergebnis wie das gesamte Ensemble (Bacher, 1994).

Aufgrund der Variabilität in den Jahreszeitreihen kommt dem Test der Stabilität eine besondere Bedeutung zu. Ein stabiles Clusterergebnis ist eine Voraussetzung dafür, dass die Variabilität der Jahreszeitreihen keinen übermäßigen Einfluss auf die Klassifikation der Stationen hat.

Eine homogene Clustereinteilung besteht aus Clustern mit annähernd gleicher Anzahl von Objekten. Ein solcher Zustand ist wünschenswert, da große Cluster zuungunsten von kleinen Clustern („snowballing“) keine Trennung innerhalb der großen Cluster bewirken. Gleichzeitig können die Klassen mit nur wenigen Mitgliedern (Ausreißer) nicht als typisch angesehen werden⁴⁶. Die Homogenität konkurriert mit der Stabilität, da ein inhomogenes Clusterergebnis stabil sein kann⁴⁷. Es muss jedoch abgewogen werden, ob ein gebildetes Cluster mit geringer Objektanzahl eine Folge von untypischen Ausreißern oder aber ein spezifisches Immissionsregime wie das der Berg-Stationen darstellt. Um untypische Ausreißer zu identifizieren, wurden die Jahreszeitreihen aus Clustern mit weniger als 30 Objekten (für Ozon 5) aus dem Ensemble entfernt und die Clusterung wiederholt. Die Klassifikation dieser Jahreszeitreihen erfolgt nachträglich mit Hilfe des Zugehörigkeitsvektors, ohne die gebildeten Cluster zu verändern.

⁴⁶ Eine Ausnahme bilden die Berg-Stationen für Ozon, die sich trotz geringer Anzahl stark von den anderen Stationen unterscheiden.

⁴⁷ Dies liegt an der erhöhten Wahrscheinlichkeit eines Treffers bei gleichbleibender Einzelwahrscheinlichkeit.

Zum Test der Stabilität und Homogenität wurden das gesamte Ensemble (Grundensemble) und 100 zufällig ausgewählte Testensembles der halben Größe geclustert. Dabei sind die folgenden Merkmale bestimmt worden:

- Abweichung der Clusterzentren des Testensembles von denen des Grundensembles
- Anzahl der Übereinstimmungen in der Zuordnung der Jahreszeitreihe mit dem Grundensemble pro Cluster
- Verteilung und Anzahl der Elemente pro Cluster im Grund- und Testensembles

Die ermittelten Merkmale der 100 Testensembles wurden mit Hilfe von Box-Whiskers-Plots⁴⁸ für jedes Set von Verfahrenskenngrößen pro Cluster dargestellt. Anhand dieser Darstellungen ist das Set mit der größten Trefferquote und der geringsten Streuung der Clusterzentren ausgewählt worden. Es wurde darauf geachtet, dass die Anzahl der Elemente möglichst ausgeglichen ist.

Um diese Auswahl zu objektivieren, lässt sich der Heidke-Skill-Score verwenden. Er ist eine Maßzahl zum Test der Übereinstimmung von kategorischen Variablen unter Berücksichtigung der Wahrscheinlichkeit des unabhängigen Zusammentreffens der Kategorien (Heidke, 1926). Er ist damit geeignet, Trefferquoten bei unterschiedlichen unabhängigen Wahrscheinlichkeiten der einzelnen Kategorien, d. h. bei unterschiedlicher Anzahl der Elemente pro Cluster (Homogenität), zu bewerten. Abbildung 2.6 zeigt beispielhaft das Ensemble der Werte des Heidke-Skill-Scores für die 100 Testensembles bei verschiedenen Skalierungen und Transformationen.

Die Ergebnisse der Stabilitätsuntersuchung hinsichtlich der Clusterbildungsmethode, der Transformation und der Skalierung der beiden Parameter (normierte Tagesschwankung und Tagesmittelwert) werden für jeden Stoff in Tabelle 5 zusammengefasst und in den folgenden Kapiteln dargelegt. Für alle Stoffe ergab die Clusterbildungsmethode WARD die stabilste Clusterung.

	Ozon	NO ₂	NO	PM10/TSP	SO ₂
Bedeutung P50ME	++	++	++	++	++
Bedeutung P50TA	++	-	-	-	-
Log-Trafo P50ME	ja	nein	ja	nein	ja
Clusterbildungsmethode	WARD	WARD	WARD	WARD	WARD

Tabelle 5 Ergebnis der Tests auf ein stabiles und homogenes Clusterergebnis hinsichtlich der Skalierung der mittleren Immission (Median des Tagesmittelwertes, P50ME) und der Tagesschwankung (Median der normierter Tagesschwankung, P50TA) sowie der logarithmischen Transformation von P50ME (++ = hohe Bedeutung, - = keine Bedeutung).

⁴⁸ Der Box-Whiskers Plot besteht aus einem Kasten, dessen Mittellinie den Median und die äußeren Begrenzungen das 1. und 3. Quartil sind. Damit befinden sich in der Box 50% der betrachteten Werte. Zu beiden Seiten der Box sind zwei weitere Grenzen definiert (inner and outer fences), die jeweils die 1.5- und 3-fache Länge des Quartilabstandes (Differenz zwischen 1. und 3. Quartil) von dem 1. bzw. 3. Quartil entfernt sind. Mögliche Daten werden innerhalb der ersten Grenze von einer durchgezogenen Linie überdeckt. Werte außerhalb der 1. Grenze werden als Ausreißer betrachtet und individuell dargestellt.

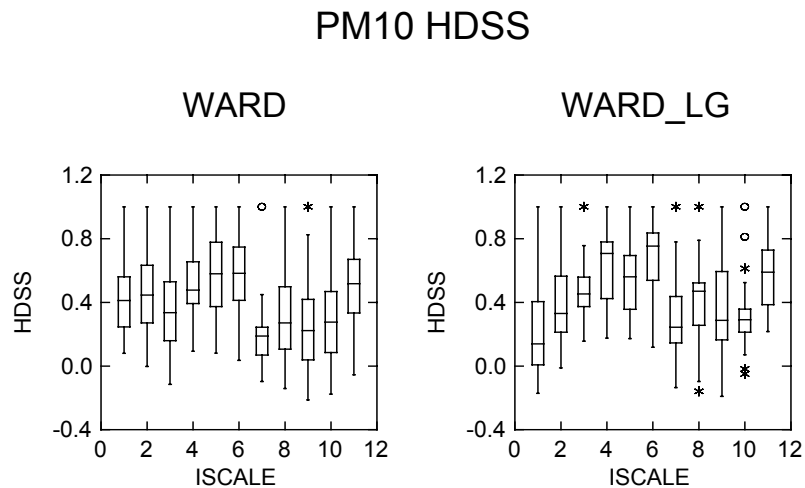


Abbildung 2.6 Test der Stabilität für verschiedene Skalierungen (ISCALE 2-6 = zunehmender Einfluss, ISCALE 7-11 = abnehmender Einfluss) des Medians der Tagesmittelwerte (P50ME) für die Clusterung von PM10 mit (rechts) und ohne (links) logarithmische Transformation. Dargestellt ist der ermittelte Wert des Heidke-Skill Scores (HDSS) für die Übereinstimmung von 100 Testenssembles mit dem Grundensemble.

2.3.2.5 Einheitliche Klassifikation und Methodik des Vergleichs

Es wäre wünschenswert, den Messstationen ein Immissionsregime für die Gesamtheit der Jahre 1995-2001 zuzuordnen, um Immissionsschwankungen aufgrund der variablen Witterung nicht als unterschiedliche Regimezugehörigkeit zu bewerten. Eine Emissionsänderung soll jedoch möglichst festgestellt werden.

Die Verfügbarkeit der Jahreszeitreihen für verschiedene Jahre ist sehr unterschiedlich. Nur ein Teil der Stationen ist für den gesamten Zeitraum mit ausreichend vollständigen Jahreszeitreihen vertreten (siehe Kapitel 1.4.1).

Aus diesem Grund bildet zunächst die Gesamtheit der Jahreszeitreihen die Basis für die Clusterung. Aus den Zeitreihen innerhalb eines Clusters wird dann ein jahresspezifisches Clusterzentrum ermittelt (Abbildung 2.7). Aus der Verschiebung der Lage der jährlichen Clusterzentren erkennt man die Variabilität der Immission im gesamten Gebiet. Sie wird hauptsächlich der jährlichen Witterungsvariabilität zugeschrieben. Die Klassifikation hinsichtlich der jahresbezogenen Zentren dient deren Kompensation.

Ist eine stationsbezogene Klassifikation erforderlich, so erfolgt die Zuordnung in das am häufigsten bestimmte Regime unter Berücksichtigung der Zugehörigkeitsvektoren (siehe Kapitel 2.3.1.3). Tritt dabei der Fall auf, dass die Klassifikationen für einzelne Jahre deutlich voneinander abweichen, so spricht dies für eine lokale Änderung des Emissionsregimes.

Der Vergleich der Clusterergebnisse verlangt eine angemessene Methodik. Für den Vergleich zweier kategorischer Variablen einer Datenmenge kann eine Kontingenztafel verwendet werden. Sie liefert die Häufigkeit aller möglichen Kombinationen des Aufeinandertreffens beider Variablen. Die Hauptdiagonalelemente geben die Anzahl der Übereinstimmungen an. Die Klassifikation der Immissionsregimes beruht auf kontinuierlich zunehmenden Parametern. Die Cluster können als Stufen der Belastung angesehen werden. Die Differenz in den Clustern dient als einfacher Indikator für deren Unterschied, um den kategorischen Vergleich zu erleichtern.

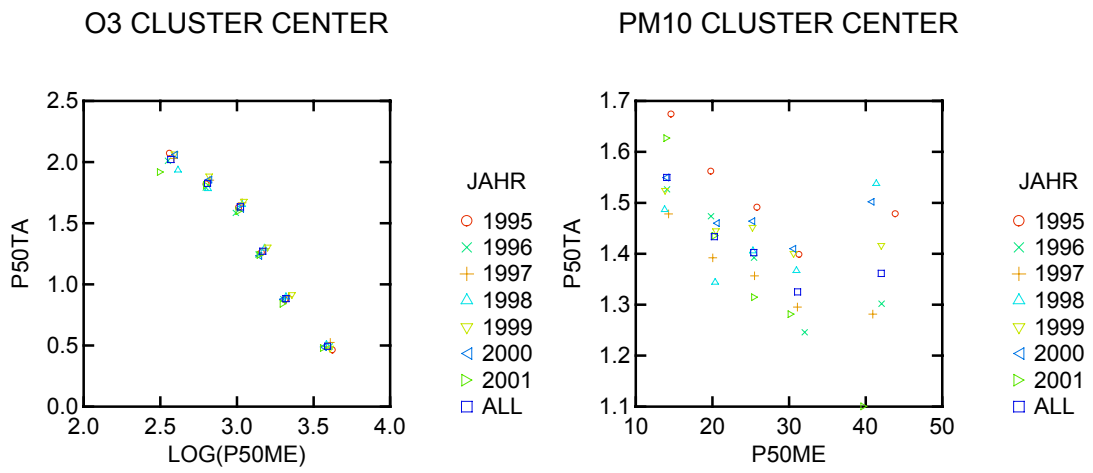


Abbildung 2.7 Lage der Cluster-Zentren für verschiedene Jahre und den gesamten Zeitraum (ALL) für Ozon (links) und PM10 (rechts)