

V–1.2

Validität von Umweltdaten

R. BEIER

Inhalt

V-1.2 Validität von Umweltdaten

1	Problemstellung	3
2	Grundlagen des Messens	3
3	Unsicherheit des Messens	6
4	Unsicherheit von Schlussfolgerungen	9
4.1	Zeitliche Repräsentativität	9
4.2	Räumliche Repräsentativität	11
4.3	Resampling	13
5	Untersuchungsplanung	15
5.1	Erhebungsverfahren	16
5.2	Erhebungsstrategie	16
5.2.1	Auswahl der Messorte	16
5.2.2	Auswahl der Messzeiten	16
5.3	Datenanalyse	17
6	Literaturverzeichnis	17

V-1.2

Validität von Umweltdaten

R. BEIER

1 Problemstellung

Systematische Umweltuntersuchungen dienen dazu, Umweltdaten zu erzeugen, die belastbare Antworten auf konkrete Fragestellungen geben. Validität ist in diesem Zusammenhang ein anderer Ausdruck für die Belastbarkeit und Gültigkeit von Umweltdaten in einem bestimmten Nutzungszusammenhang. Die Validität von Umweltdaten, in diesem Sinne verstanden, wird bestimmt durch den Prozess der Datenerzeugung auf der einen Seite und durch den Prozess der Übertragung der erzeugten Daten in den interessierenden Nutzungszusammenhang auf der anderen Seite. Um die Validität von Umweltdaten in einem bestimmten Nutzungszusammenhang bewerten zu können, ist es folglich notwendig, die Unsicherheit des Prozesses der Datenerzeugung und die Unsicherheit der Übertragung dieser Daten in den interessierenden Nutzungszusammenhang zu ermitteln. Während für den ersten Teil der Aufgabenstellung Methoden der deskriptiven Statistik herangezogen werden können, sind für den zweiten Teil Methoden der schließenden Statistik erforderlich.

Ziel des vorliegenden Beitrages ist es, (a) allgemeine Grundlagen für eine quantitative Bewertung der Validität von Umweltdaten im vorbeschriebenen Sinn darzustellen und (b) die Anwendung dieser Grundlagen anhand exemplarischer Beispiele zu erläutern. Um ausschließlich einen Überblick über das allgemeine Konzept zu erhalten, kann auf ein Studium der Beispiele verzichtet werden.

Unsicherheiten von Messergebnissen und Schlussfolgerungen werden im Folgenden einheitlich durch „Standardunsicherheiten“ quantifiziert. Damit werden Empfehlungen des „Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen“ (DIN 1995) umgesetzt, der den aktuellen Stand der Diskussion bezüglich der Bewertung der Qualität von Messdaten beschreibt. Abschnitt 2 enthält eine Darstellung der methodischen Grundlagen des Messens und der Modellierung von Messprozessen. Damit wird eine notwendige Voraussetzung geschaffen für die Analyse der Unsicherheiten von Messprozessen im Abschnitt 3. Dort werden moderne Methoden zur Ermittlung messtechnisch bedingter Unsicherheiten vorgestellt. Diese basieren auf einer Verallgemeinerung der Regeln der Gauß'schen Fehlerfortpflanzung (DIN 1995). In Abschnitt 4 wird gezeigt, dass die Ermittlung der Unsicherheiten von Schlussfolgerungen, die aus Erhebungsdaten abgeleitet werden, im Rahmen des Konzeptes des „Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen“ (DIN 1995) nahtlos eingeordnet werden können. Dabei wird deutlich, dass der-

artige Unsicherheiten ein Maß für die begrenzte zeitliche bzw. räumliche Repräsentativität von Erhebungsdaten sind. Repräsentativität ist in diesem Zusammenhang ein Ausdruck für die Übertragbarkeit von Ergebnissen begrenzter Untersuchungen in erweiterte Nutzungszusammenhänge. Beeinflusst werden kann die Validität von Umweltdaten bereits im Planungsstadium einer Erhebung. In Abschnitt 5 wird eine systematische Vorgehensweise für diesen Zweck beschrieben. Ziel der Untersuchungsplanung ist es, die Erhebungsprozesse und Randbedingungen einer durchzuführenden Untersuchung so festzulegen, dass die erzeugten Umweltdaten die gewünschte Datenqualität aufweisen und abgeleitete Aussagen und Bewertungen die erforderliche Validität erreichen.

2 Grundlagen des Messens

Die naturwissenschaftlichen und technischen Disziplinen erheben den Anspruch, intersubjektiv nachprüfbar Beschreibungen und Modelle ihrer Untersuchungsgegenstände zu liefern. Zu diesem Zweck werden Messungen durchgeführt. Dabei wird der interessierende Untersuchungsgegenstand, das sogenannte Messobjekt, mit einem Maßstab der interessierenden Messgröße verglichen. Dieser Vergleich wird im Rahmen eines spezifizierten Messprozesses durch eine geeignete Messeinrichtung oder ein geeignetes Messverfahren vermittelt. Die erreichbare Qualität einer Messung wird bestimmt durch die Unsicherheit des benutzten Maßstabes und die Ausführung des Messprozesses. Während die Unsicherheiten der Ausführung eines Messprozesses bei hinreichender Kontrolle zu zufälligen Abweichungen der Messwerte führen, macht sich die Unsicherheit des benutzten Maßstabes als systematische Unsicherheit erzeugter Messwerte bemerkbar. Die notwendige Ermittlung der Unsicherheit des Maßstabes erfolgt durch die Verknüpfung mit anerkannten Bezugsnormen der interessierenden Messgröße. Dies kann geschehen durch

- Anwendung primärer Messverfahren,
- Anwendung zertifizierter Messeinrichtungen,
- Kalibrierung der Messeinrichtung mit Hilfe anerkannter Bezugsnormale,
- Vergleichsmessungen mit Messeinrichtungen, die andere Messverfahren realisieren.

Ein primäres Messverfahren erzeugt Messwerte und die zugehörigen Unsicherheitsangaben ohne Bezug auf andere Messnormale (QUINN 1997). Primäre Messverfahren sind dazu geeignet, Normale komplexer Messgrößen zu repräsentieren und die Verknüpfung zu Basiseinheiten des SI-Systems

herzustellen (RICHTER & DUBE 1997). Durch Anwendung primärer Messverfahren bei der Zertifizierung oder Kalibrierung von Messeinrichtungen kann die Rückführbarkeit von Messungen auf SI-Einheiten hergestellt werden.

Eine zertifizierte Messeinrichtung liefert Messwerte bekannter Unsicherheit, deren Bezug auf anerkannte Normale des SI-Systems in einer dokumentierten Prozedur ermittelt wurde. Zertifizierungen von Messeinrichtungen und Normalen werden von nationalen metrologischen Instituten wie der Physikalisch Technischen Bundesanstalt in Braunschweig oder anderen Stellen, die für diese Tätigkeit akkreditiert sind, durchgeführt. Zertifizierte Messeinrichtungen oder zertifizierte Normale können dazu benutzt werden, Messeinrichtungen zu kalibrieren. Durch ihre Anwendung kann die Rückführbarkeit von Messungen auf SI-Einheiten hergestellt werden. Im Rahmen von Umweltuntersuchungen werden gelegentlich komplexe Messgrößen untersucht, wie Massenkonzentrationen chemischer Substanzen in Umweltproben oder definierte biologische Strukturen. Für derartige Messgrößen sind zertifizierte Normale, die rückführbar sind auf SI-Einheiten, gelegentlich nicht marktfähig. In derartigen Fällen ist der Herstellung von Bezugsnormalen und der Ermittlung ihrer Unsicherheiten besondere Aufmerksamkeit zu schenken. Geeignete Bezugsnormale können durch Referenzmaterialien oder Referenzmesseinrichtungen realisiert werden. Die Unsicherheiten derartiger Referenznormale können durch Vergleichsmessungen beispielsweise im Rahmen von Ringversuchen ermittelt werden.

Neben der Unsicherheit der benutzten Maßstäbe kommt der Ausführung des Messprozesses eine entscheidende Rolle für die Qualität der erzeugten Messergebnisse zu. Für eine systematische Ermittlung der Unsicherheiten eines Messprozesses ist es erforderlich, den Ablauf durch ein geeignetes mathematisches Modell zu beschreiben, in welchem das Messergebnis X als Funktion aller Größen dargestellt wird, die Einfluss auf das Messergebnis und damit auch auf die Unsicherheit des Ergebnisses nehmen.

$$X = f(Y_1, Y_2, \dots; p_1, p_2, \dots) \quad (1)$$

In der exemplarischen Modellgleichung (1) stehen die Einflussgrößen $Y_1, Y_2, \dots$ beobachtbare Prädiktoren des Messprozesses, die sich bei jeder individuellen Messung ändern können. Die Parameter $p_1, p_2, \dots$ bezeichnen dagegen Einflussgrößen, die sich nicht bei jeder Einzelmessung ändern. Hierzu zählen insbesondere die zur Kalibrierung der Messeinrichtung benutzten Bezugsnormale. Die Bezugsnormale können entweder direkt als Einflussgrößen in der Modellgleichung auftreten oder versteckt in Parametern der Modellgleichung, die bei der Kalibrierung ermittelt werden.

Eventuell vorhandene Zeit- und Ortsabhängigkeiten der Messgröße X werden im Rahmen der Modellgleichung des Messprozesses nicht beschrieben. Derartige Raum-Zeit-Modelle werden in Abschnitt 4 angegeben und benutzt, um die Unsicherheiten von Schlussfolgerungen zu ermitteln, die aus Erhebungsdaten abgeleitet werden.

Die Aufstellung einer geeigneten Modellgleichung für den Messprozess ist eine entscheidende Voraussetzung für seine

kontrollierte Ausführung sowie für die Analyse der zugehörigen Unsicherheit. Dazu ist sicherzustellen, dass die Modellgleichung nach allen Einflussgrößen des Messprozesses differenzierbar ist. Um dies zu erreichen, kann bei der Aufstellung der Modellgleichung folgende Vorgehensweise Anwendung finden: Zunächst ist zu klären, welche Prädiktoren Y_i bei jeder Einzelmessung zu beobachten sind. Dies ist zumindest ein abgelesener Skalenwert. Falls thermodynamische Zustandsgrößen wie Druck und Temperatur bei jeder Einzelmessung bestimmt werden, sind sie auch in die Liste der Y_i aufzunehmen. Als Ergebnis wird ein vollständiger und redundanzfreier Satz von Prädiktoren Y_i des Messprozesses benötigt, die untereinander nicht korreliert sind. Der einfachste Ansatz für die Modellgleichung einer (skalaren) Messgröße X ist dann gegeben durch Gleichung (2).

$$X = a + \sum_i b_i \cdot [Y_i - c_i] \quad (2)$$

Die Parameter a , b_i und c_i der Modellgleichung (2) sind durch gezielte Variation der Prädiktoren unter kontrollierten Bedingungen beispielsweise in einer Validierungsstudie experimentell zu ermitteln. Zusätzlich sind die Standardunsicherheiten der so ermittelten Parameter zu quantifizieren. Das mathematische Rüstzeug hierfür liefert die Regressionsanalyse (FULLER 1981). Eine Modellgleichung vom Typ (2) empfiehlt sich unter anderem auch dann, wenn es Prädiktoren Y_i des Messprozesses gibt, die zwar unter den Bedingungen der Kalibrierung vollständig kontrolliert werden, unter den Bedingungen des Messeinsatzes jedoch bestenfalls gelegentlich kontrolliert werden können. In derartigen Fällen wird in der Anwendung $Y_i = c_i$ gesetzt, das entspricht dem Wert, der bei der Kalibrierung ermittelt wurde. So wird die Ermittlung der Messwerte X mittels Modellgleichung (2) möglich, ohne alle Prädiktoren Y_i bei jeder Einzelmessung bestimmen zu müssen. In einem derartigen Fall ist es jedoch erforderlich, das Intervall $[\text{Min}(Y_i); \text{Max}(Y_i)]$ zu bestimmen, in dem der Prädiktor Y_i im Messeinsatz zu erwarten ist. Diese Informationen und die Kenntnis der zugehörigen Empfindlichkeiten b_i sind unverzichtbar für die Ermittlung der Unsicherheitsbeiträge der Einflussgrößen Y_i .

Ziel der nachfolgenden Unsicherheitsbetrachtungen ist es, eine Bilanzgleichung für die Gesamtunsicherheit eines Messergebnisses X in einem bestimmten Nutzungszusammenhang aufzustellen. Die allgemeine Form dieser Bilanzgleichung ist in Gleichung (3) angegeben.

$$u^2(X) = u^2_M(X) + u^2_T(X) + u^2_S(X) \quad (3)$$

Hier beschreibt $u^2(X)$ die Gesamtunsicherheit des Messergebnisses X durch eine Varianz. Die sogenannte Standardunsicherheit $u(X)$ hat folglich die Bedeutung einer Standardabweichung der Häufigkeitsverteilung des Messergebnisses X , die man bei hinreichender und unabhängiger Anwendung des gesamten Messprozesses auf dasselbe Messobjekt finden würde. Der Term $u^2_M(X)$ beschreibt den Beitrag des Messprozesses zur Unsicherheitsbilanz von X als Varianz. Der Term $u^2_T(X)$ charakterisiert den Beitrag der unvollständigen Erfassung der zu bewertenden zeitlichen Strukturen durch die durchgeführten Messungen und $u^2_S(X)$ beschreibt den Beitrag der unvollständigen Erfassung der zu bewertenden

räumlichen Strukturen durch die durchgeführten Messungen. Die in Gleichung (3) beschriebene Aufteilung der Unsicherheitsbilanz wird erforderlich, da es im Rahmen der Modellgleichung des Messprozesses nicht gelingt, Beiträge der unvollständigen messtechnischen Erfassung untersuchter zeitlicher oder räumlicher Strukturen des interessierenden Messobjektes in der Modellgleichung des Messprozesses geschlossen darzustellen.

Nachfolgend werden in vier Beispielen typische Modellgleichungen von Messprozessen angegeben. Die Ermittlung von zugehörigen Unsicherheitsbeiträgen wird in den Beispielen des Abschnitts 3 beschrieben.

Beispiel 1.1: Ermittlung von Messwerten mit Hilfe einer geradlinigen Modellgleichung.

Die betrachtete Messeinrichtung erzeuge ein skalares Messsignal Y und weise eine geradlinige Kalibrierfunktion auf. Der zugehörige skalare Messwert X kann durch eine Modellgleichung der Gestalt (4) beschrieben werden.

$$X = c + b \cdot (Y - a) \quad (4)$$

Neben dem Messsignal Y weist diese Modellgleichung die Einflussgrößen a , b , c auf. Die Werte dieser Einflussgrößen und ihre Unsicherheiten können beispielsweise durch Auswertung eines Datensatzes (5) erhalten werden, der bei der Kalibrierung der Messeinrichtung ermittelt wurde.

$$\{(c_0(i), y(i, j)); j = 1, \dots, n_w; i = 1, \dots, K\} \quad (5)$$

Der Datensatz (5) wurde so erzeugt, dass K verschiedene (zertifizierte) Messnormale $c_0(i)$ jeweils n_w -mal mit dem Response $y(i, j)$ der Messeinrichtung verglichen wurden. Durch Auswertung des Datensatzes (5) erhält man für die Parameter a , b , c die nachfolgend angegebenen Schätzwerte.

$$a = \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^{n_w} y(i, j) / (n_w \cdot K) \quad (6)$$

$$c = \sum_{i=1}^K c_0(i) / K \quad (7)$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^{n_w} [y(i, j) - a] \cdot [c_0(i) - c]}{\sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^{n_w} [y(i, j) - a]^2} \quad (8)$$

Durch die Verwendung der dreiparametrischen Geradengleichung (4) wird erreicht, dass die Parameter a , b , c keine Korrelationen aufweisen. Dies erweist sich als Vorteil bei der Ermittlung der zugehörigen Standardunsicherheiten (siehe Beispiel 1.2).

Die beschriebene Lösung ist in einem strengen Sinne optimal, wenn die Standardunsicherheit $u(c_0)$ der benutzten Messnormale vernachlässigt werden kann und die Standardunsicherheit $u(y)$ nicht von der Höhe des Messsignales y abhängt. Die beschriebene Lösung ist zudem sehr robust gegen Abweichungen von diesen Randbedingungen. So stellt sie auch in dem Fall, dass $u(c_0)$ nicht vernachlässigt werden kann, eine gute Näherungslösung dar, sofern folgende Bedingungen eingestellt sind:

$$u(c_0) \ll \text{Max}\{c_0(i)\} - \text{Min}\{c_0(i)\} \text{ und} \\ u(y) \ll \text{Max}\{y(i, j)\} - \text{Min}\{y(i, j)\}$$

Dies bedeutet, dass die Standardunsicherheit der Messnormale, $u(c_0)$ klein sein soll gegenüber der Spannweite der verwendeten Messnormale. Eine vergleichbare Forderung gilt für das Messsignal y der betrachteten Messeinrichtung. Diese Bedingungen können durch geeignete Wahl der Messnormale $c_0(i)$ eingestellt werden.

Beispiel 2.1: Ermittlung des arithmetischen Mittelwertes aus einer Stichprobe.

Gegeben sei eine Messreihe bestehend aus n unabhängig voneinander an einem festen Messort registrierten Merkmalswerten $X(i)$ mit $i = 1, \dots, n$ aus einem endlichen Zeitverlauf der Länge T_M . Gesucht werde der arithmetische Mittelwert X_M der Messreihe. Der einzelne Messwert $X(i)$ entspreche einer Sammelzeit $T_s \leq T_M$. Die maximal mögliche Anzahl von Messwerten aus dem Zeitintervall ist mithin $N = T_M/T_s$. Die Anzahl der Fehlwerte $N_{\text{mis}} = N - n$ sei zufällig über das Zeitintervall T_M verteilt. Sofern außerdem die Einstellzeit T_R der eingesetzten Messeinrichtung kürzer ist als die Sammelzeit T_s , kann die betrachtete Messreihe als zufällige Stichprobe aus einer endlichen Gesamtheit angesehen werden. Der gesuchte arithmetische Mittelwert ist zu errechnen gemäß Gl. (9).

$$X_M = \sum_{i=1}^n X(i) \quad (9)$$

Fehlende Messwerte sind bei der Berechnung des arithmetischen Mittelwertes nicht zu berücksichtigen, auch dann nicht, wenn sie durch eine zweckmäßig erscheinende Interpolationsvorschrift aufgefüllt wurden. Die Ermittlung von Beiträgen zur Standardunsicherheit von X_M wird in den Beispielen 2.2 und 2.3 beschrieben.

Beispiel 3.1: Ermittlung des Anteiles p aus einer Stichprobe.

Messvorgang: 1. Markierung eines Triebes der Mindestlänge D an einem typischen Baum der interessierenden Spezies. 2. Ermittlung der Anzahl n aller Blätter am markierten Trieb. 3. Ermittlung der Anzahl n_s geschädigter Blätter am markierten Trieb. Die zugehörige Modellgleichung lautet

$$p = n_s/n. \quad (10)$$

Einflussfaktoren der Modellgleichung sind in diesem Fall die Messgrößen n_s und n . Die Ermittlung von Beiträgen zur Standardunsicherheit des Schätzwertes p wird in den Beispielen 3.2 und 3.3 beschrieben.

Beispiel 4.1: Ermittlung des p.100-Perzentils aus einer Stichprobe.

Bei umweltbezogenen Untersuchungen sind als Ergebnisse oft Perzentile wie der Median (= 50-Perzentil) oder das 98-Perzentil einer endlichen Population vom Umfang N aus einer Stichprobe vom Umfang n zu ermitteln. Gleichbedeutend mit dem p.100-Perzentil werden die Begriffe p-Quantil und p.100-Prozentwert benutzt. Das p.100-Perzentil X_p einer Verteilung aus einer stochastischen Stichprobe vom Umfang n geschätzt durch den kleinsten Messwert $X_{(k)}$ der Stichprobe

be, der größer ist als p.100 Prozent aller n Messwerte der Stichprobe, wie in Gl. (11) beschrieben (BÜNING & TRENKLER 1978).

$$X_p = X_{(k)} \text{ mit } k = 1 + \text{INT}(n \cdot p) \quad (11)$$

Hier gibt $\text{INT}(\cdot)$ den ganzzahligen Anteil der Zahl in der Klammer an und $X_{(k)}$ ist der Messwert mit Rangplatz k aus der untersuchten Stichprobe vom Umfang n . Den Rangplatz eines Messwertes findet man, indem man die Messwerte der Stichprobe der Größe nach aufsteigend wie folgt anordnet:

$$X_{(1)} \leq X_{(2)} \leq \dots \leq X_{(n)} \quad (12)$$

Für den Median X_{50} hat sich folgende Modifikation der Regel (12) eingebürgert.

$$\begin{aligned} X_{50} &= X_{(k)} && \text{für ungeradzählige } n \text{ und} \\ X_{50} &= 0,5 \cdot (X_{(k)} + X_{(k-1)}) && \text{für geradzählige } n \text{ mit} \\ &k = 1 + \text{INT}(0,5 \cdot n) \end{aligned}$$

Die Ermittlung von Beiträgen zur Standardunsicherheit des Schätzwertes X_p wird in den Beispielen 4.2 und 4.3 beschrieben.

3 Unsicherheit des Messens

Das besondere Verdienst des „Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen“ (DIN 1995) besteht darin, die Behandlung zufälliger und systematischer Beiträge in der Unsicherheitsbilanz eines Messprozesses zu vereinheitlichen. Systematische Abweichungen eines Messprozesses sollten so weit wie möglich begrenzt werden, beispielsweise durch regelmäßige Kalibrierung. Es bleiben jedoch in der Regel unbekannte systematische Abweichungen, die hervorgerufen werden durch Einflussgrößen, denen ein fester Wert zugewiesen wurde, der selbst jedoch eine zufällige und deshalb unbekannte Abweichung von dem wahren Wert aufweist. Dies trifft in jedem Fall zu für Bezugsnormale, die bei der Kalibrierung des Messprozesses Anwendung fanden. Resultierende systematische Abweichungen werden im „Leitfaden“ (DIN 1995) statistisch in gleicher Weise quantifiziert wie zufällige Abweichungen, nämlich durch Varianzen und Kovarianzen. Das mathematische Instrumentarium dazu liefert die Gauß'sche Regel der Fehlerfortpflanzung, die heute Unsicherheitsfortpflanzung genannt wird. Dieses Instrumentarium wird genutzt, um aus der Modellgleichung des Messprozesses eine Bilanzgleichung für die Unsicherheit des Messergebnisses X abzuleiten. Für die exemplarischen Modellgleichungen (1) und (2) erhält man folgende Bilanzgleichungen für die Standardunsicherheit $u_M(X)$, die durch den Messprozess hervorgerufen wird.

$$\begin{aligned} u_M^2(X) &= u^2(a) + \sum b_i^2 \cdot [u^2(Y_i) + u^2(c_i)] + \\ &+ \sum u^2(b_j) \cdot [Y_i + c_i]^2 \end{aligned} \quad (13)$$

Die Varianzgleichung (13) gilt unter der Bedingung, dass die Einflussgrößen des Messprozesses nicht korreliert sind. Sofern die Einflussgrößen des Messprozesses Korrelationen aufweisen, sind zusätzlich auch Kovarianzterme zu berücksichtigen (DIN 1995). Gleichung (13) beschreibt das Qua-

drat der Standardunsicherheit $u_M(X)$ des Messergebnisses X durch eine gewichtete Summe der Varianzen der Einflussgrößen der Modellgleichung (2). Die Varianzen der Einflussgrößen sind ihrerseits ebenfalls Quadrate der Standardunsicherheiten der Einflussgrößen Y_i und a , b_i und c_i . Entscheidend für die Quantifizierung der Unsicherheit eines Messprozesses ist mithin die Kenntnis der Varianzen und gegebenenfalls auch der Kovarianzen der Einflussgrößen des Messprozesses. Im „Leitfaden“ (DIN 1995) werden zwei Wege zur Ermittlung von Varianzen beschrieben, die sogenannte Typ-A- und die Typ-B-Auswertung. Tatsächlich macht der „Leitfaden“ (DIN 1995) jedoch Gebrauch von einem weiteren Auswertungstyp, der im Folgenden Typ-C-Auswertung genannt wird. Die Typ-C-Auswertung erfordert den geringsten Aufwand, sollte deshalb zuerst in Betracht gezogen werden.

Die Typ-C-Auswertung ist anzuwenden auf Einflussgrößen, denen ein bekannter Wert zugewiesen wird, der bei der Ausführung des Messprozesses keine Variationen erfährt. In diesem Fall ist zu fordern, dass auch die Standardunsicherheit bekannt sein muss, beispielsweise aus dem Kalibrier- oder aus einem Zertifizierungszeugnis. Dieser Fall gilt beispielsweise für die zur Kalibrierung benutzten Bezugsnormale. Es ist zwingend erforderlich, dass nicht nur der Wert eines Bezugsnormales bekannt ist, sondern auch seine Standardunsicherheit.

Die Typ-A-Auswertung ist die Methode der Wahl zur Ermittlung der Varianz $u^2(Y_i)$ einer Einflussgröße Y_i , wenn Wiederholungsmessungen dieser Einflussgröße bei festem Messobjekt unter den Anwendungsbedingungen des Messprozesses vorliegen. Derartige Messungen können beispielsweise durch regelmäßige Aufgabe einer Kontrollprobe erhalten werden. In diesem Fall liegt folglich eine Stichprobe von Messwerten $y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{iN}$ der Einflussgröße Y_i vor. Die gesuchte Varianz ist dann gegeben durch Gleichung (14).

$$u^2(Y_i) = \sum_{j=1}^N [y_{ij} - \bar{y}_i]^2 / (N-1) \quad (14)$$

Der Term $\bar{y}_i$ beschreibt dabei den arithmetischen Mittelwert der Messwerte y_{ij} .

Eine Typ-B-Auswertung wird erforderlich, wenn einem Prädiktor Y_i im Messeinsatz ein fester Wert $Y_i(0)$ zugewiesen wurde, eine Auswertung gemäß Typ-C jedoch nicht möglich ist. In diesem Fall ist es erforderlich, eine begründete konservative Annahme über die Bandbreite $[\text{Min}(Y_i); \text{Max}(Y_i)]$ zu treffen, innerhalb der die Einflussgröße Y_i bei der Durchführung des Messprozesses vermutlich angetroffen wurde. Die ungünstigste Annahme besteht dann darin, eine Gleichverteilung der Einflussgröße Y_i in dem Intervall $[\text{Min}(Y_i); \text{Max}(Y_i)]$ zu unterstellen.

In diesem Fall erhält man die gesuchte Varianz der Einflussgröße Y_i mit Hilfe von Gleichung (15).

$$\begin{aligned} u^2(Y_i) &= [\text{Max}(Y_i) - \text{Min}(Y_i)]^2 / 12 + \\ &+ \{[\text{Max}(Y_i) - \text{Min}(Y_i)] / 2 - Y_i(0)\}^2 \end{aligned} \quad (15)$$

Im Fall $Y_i(0) = [\text{Max}(Y_i) - \text{Min}(Y_i)] / 2$ erhält man die vereinfachte Lösung

$$u^2(Y_i) = [\text{Max}(Y_i) - \text{Min}(Y_i)]^2 / 12.$$

Typ-B-Auswertungen sind insbesondere dann erforderlich, wenn es Einflussgrößen gibt, die im Feldeinsatz nicht fortlaufend kontrolliert werden (können), obwohl sie Veränderungen unterliegen. Zu nennen sind hier beispielsweise Matrixeffekte bei der chemischen Analytik im Rahmen umweltanalytischer Untersuchungen.

Obwohl der „Leitfaden“ (DIN 1995) eine Unterscheidung zwischen systematischen und zufälligen Abweichungen nicht für erforderlich hält, ist dies oft zweckmäßig oder sogar geboten. In jedem Fall ist es möglich, die Unsicherheitsbilanz zu sortieren nach systematischen und zufälligen Beiträgen, wie in Gleichung (16) dargestellt.

$$u^2_M(X) = u^2_{sys}(X) + u^2_{ran}(X) \quad (16)$$

Hier beschreibt $u^2_{ran}(X)$ den zufälligen Beitrag zur Unsicherheitsbilanz von X , der ermittelt werden kann als die Wiederholvarianz des Messwertes X . Der Term $u^2_{sys}(X)$ beschreibt den systematischen Beitrag zur Unsicherheitsbilanz von X als mittlere quadratische Abweichung.

Unbedingt erforderlich ist eine Zerlegung der Unsicherheitsbilanz in einen systematischen und einen zufälligen Anteil, wenn die Messwerte X zu einem späteren Zeitpunkt zeitlich oder räumlich zu (gewichteten) Mittelwerten aggregiert werden sollen. Der Grund hierfür liegt in der unterschiedlichen Fortpflanzung systematischer und zufälliger Unsicherheitsbeiträge. Bei Mittelwerten, beispielsweise, kann der systematische Beitrag zur Unsicherheit auch dann dominierend werden, wenn er beim Einzelwert eine nachgeordnete Rolle spielt.

Hilfreich ist die Darstellungsweise der Gleichung (16) als Ansatz, wenn die Aufstellung einer Modellgleichung nicht gelingt. Dann wird Gleichung (16) zur Basis für die Ermittlung der Unsicherheit einer Messeinrichtung (als Realisierung eines Messprozesses) durch Vergleichsmessungen mit Messeinrichtungen anderer Bauart und Messprinzipien. Diese Vorgehensweise ist zwingend erforderlich, wenn eine Kalibrierung der Messeinrichtung mit anerkannten Bezugsnormen nicht möglich ist.

Die Randbedingungen von Vergleichsmessungen sollen denjenigen des Messeinsatzes soweit wie möglich entsprechen. Diese Bedingung ist erfüllt, wenn alle Störgrößen, die als Einflussgrößen im Messprozess zu erwarten sind, auch bei der Durchführung der Vergleichsmessungen kontrolliert variiert werden können. Dies gilt beispielsweise auch für Matrixeffekte in der chemischen Analytik von Umweltproben. Vergleichsmessungen mit mehreren Messeinrichtungen, die unterschiedliche Messverfahren realisieren, können beispielsweise in Ringversuchen durchgeführt werden. Im Rahmen derartiger Vergleichsmessungen ist es erforderlich, eine Verfahrensweise zur Ermittlung des jeweiligen „wahren“ Wertes festzulegen. Dies kann beispielsweise der Median der beteiligten Messeinrichtungen sein. Als Ergebnis eines derartigen Ringversuches können folgende Informationen über die Unsicherheit einer beteiligten Messeinrichtung auf jedem betrachteten Messniveau erhalten werden:

$u^2_M(X)$: Mittlere quadratische Abweichung der Messwerte X , die im Ringversuch mit einer bestimmten

Messeinrichtung erhalten wurden, von dem anerkannten „wahren“ Wert.

$u^2_{ran}(X)$: Mittlere quadratische Abweichung der Messwerte X , die im Ringversuch mit einer bestimmten Messeinrichtung erhalten wurden, vom Mittelwert dieser Messwerte.

$u^2_{sys}(X)$: $u^2_M(X) - u^2_{ran}(X)$.
Mittlere quadratische Abweichung der Messwerte X , die im Ringversuch mit einer bestimmten Messeinrichtung erhalten wurden, aber nicht durch zufällige Abweichungen erklärt wird. Maß für die systematische Abweichung von X . (17)

Sofern in einem Ringversuch nicht alle Teile des interessierenden Messprozesses abgebildet werden können, sind die nicht erfassten Unsicherheitsbeiträge gesondert zu ermitteln. Durch die Anwendung des „Leitfaden“ (DIN 1995) wird eine wesentliche Vereinfachung und Vereinheitlichung der Unsicherheitsbetrachtungen erreicht. Die Schwierigkeiten mit den Begriffen „Präzision“ und „Richtigkeit“ und ihrer Quantifizierung werden damit elegant gelöst.

Nachfolgend wird die Ermittlung der messtechnisch bedingten Beiträge zu Standardunsicherheiten für die Beispiele aus Abschnitt 2 demonstriert.

Beispiel 1.2: Ermittlung von Messwerten mit Hilfe einer geradlinigen Modellgleichung.

Gesucht werde die Standardunsicherheit $u(X)$ eines Messwertes X , der mit Hilfe der geradlinigen Modellgleichung (3) aus Beispiel 1.1 gewonnen wurde. Für die gesuchte Varianz des Messwertes X erhält man aufgrund der Regeln der Unsicherheitsfortpflanzung die Varianzgleichung (18).

$$u^2_M(X) = u^2(c) + u^2(b) \cdot [Y - a]^2 + b^2 \cdot [u^2(Y) + u^2(a)] \quad (18)$$

Durch Verwendung der dreiparametrischen Form der Geradengleichung wurde erreicht, dass die Parameter a , b , c nicht korreliert sind. Die Varianzen $u^2(a)$, $u^2(b)$ und $u^2(c)$ werden in der Regel durch Auswertung von Kalibrierdaten ermittelt. Eine geeignete einfache Methodik wurde an anderer Stelle beschrieben (BEIER & KORDECKI 1999; FULLER 1981).

$$u^2(a) = \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^{n_w} u^2(y(i, j)) / (n_w \cdot K) \quad (19)$$

$$u^2(c) = \sum_{i=1}^K u^2(c_0(i)) / K^2 \quad (20)$$

$$u^2(b) = u^2(e_x) / \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^{n_w} [y(i, j) - a]^2 \quad (21)$$

mit der Residualvarianz $u^2(e_x)$ gegeben durch

$$u^2(e_x) = \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^{n_w} [x'(i, j) - c_0(i)]^2 / (n_w \cdot K) \quad (22)$$

und

$$x(i, j) = c + b \cdot [y(i, j) - a] \quad (23)$$

Im Weiteren wird dies konkretisiert für den Fall konstanter Unsicherheit der eingesetzten Messnormale und der ka-

librierten Messeinrichtung ($u(c_0(i)) = \text{konstant} = u(c_0)$ und $u(x(i, j)) = \text{konstant} = u(x)$). Damit erhält man für die Standardunsicherheit des Messwertes X nachfolgende Relation.

$$u^2_M(X) = u^2(c_0) / K + b^2 \cdot [u^2(y) / (n_w \cdot K) + u^2(Y)] + u^2(b) \cdot [X - c]^2 / b^2 \quad (24)$$

Anhand von Gl. (24) ist zu erkennen, dass die Standardunsicherheit des Messwertes X einen systematischen Anteil $u_{\text{sys}}(X)$ enthält, der durch die Kalibrierung hervorgerufen wird, und einen zufälligen Anteil $u_{\text{ran}}(X)$, der vom individuellen Messwert X bestimmt wird. Der zufällige Anteil ist gegeben durch

$$u^2_{\text{ran}}(X) = [u(Y) \cdot b]^2. \quad (25)$$

Dieser zufällige Anteil der Standardunsicherheit $u(X)$ kann beispielsweise als Wiederholstandardabweichung ermittelt werden. Wie wichtig es ist, den zufälligen Anteil und den systematischen Anteil der Standardabweichung $u(X)$ gesondert aufzuführen, erkennt man am folgenden Beispiel 2.2. Die vorstehend beschriebene Methodik ist zugeschnitten auf den Fall, dass sowohl die Standardunsicherheit der Messnormale $u(c_0)$ als auch die Standardunsicherheit $u(y)$ der benutzten Messeinrichtung konstant sind. Man kann sich jedoch leicht davon überzeugen, dass die beschriebene Methodik robust ist gegenüber Abweichungen von dieser Voraussetzung.

Beispiel 2.2: Ermittlung des arithmetischen Mittelwertes aus einer Stichprobe.

Gegeben sei ein Mittelwert X_M aus einer zufälligen Stichprobe vom Umfang n (vgl. Beispiel 2.1). Gesucht werde die Standardunsicherheit des Mittelwertes X_M . Die Messwerte $X(i)$ seien mit einer Messeinrichtung registriert worden, die eine geradlinige Modellgleichung vom Typ (1) aufweist. Der messtechnisch bedingte Anteil $u^2_M(X_M)$ der Standardunsicherheit des Mittelwertes X_M ist gegeben durch Gleichung (26).

$$u^2_M(X_M) = u^2(c_0) / K + b^2 \cdot [u^2(y) / (n_w \cdot K) + u^2(Y)/N] + u^2(b) \cdot [X_M - c]^2 / b^2 \quad (26)$$

Vergleicht man dieses Resultat mit (24), so findet man den in Gleichung (27) dargestellten Zusammenhang.

$$u^2_M(X_M) = u^2_{\text{ran}}(X) / N + u^2(c_0) / K + b^2 \cdot u^2(y) / (n_w \cdot K) + u^2(b) \cdot [X_M - c]^2 / b^2 \quad (27)$$

Man erkennt leicht, dass gilt

$$u^2_M(X_M) > u^2_{\text{ran}}(X) / N. \quad (28)$$

Dies macht deutlich, dass die Bedingungen für die Gültigkeit der aus Lehrbüchern der Statistik wohl bekannten Gleichung $u^2(X_M) = u^2(X) / N$ im Bereich der Umweltbeobachtung gelegentlich nicht erfüllt sind. Bezüglich der Eignung der beschriebenen Lösung gelten dieselben Ausführungen wie in Beispiel 2.1. Die beschriebene Methodik ist zugeschnitten auf den Fall, dass sowohl die Standardunsicherheit der Messnormale $u(c_0)$ als auch die Standardunsicherheit $u(y)$ der benutzten Messeinrichtung konstant sind. Man kann sich jedoch leicht davon überzeugen, dass die beschriebene Metho-

dik robust ist gegenüber Abweichungen von dieser Voraussetzung. Die Ermittlung des Beitrages der unvollständigen Erfassung der untersuchten Population zur Standardunsicherheit des Mittelwertes wird im Beispiel 2.3 beschrieben.

Beispiel 3.2: Ermittlung des Anteiles p aus einer Stichprobe.

Gegeben sei eine zufällige Stichprobe vom Umfang n aus einer endlichen Population vom Umfang N . n_s Einheiten (Blätter) weisen ein interessierendes Merkmal (Schadbild) auf. Ein Schätzwert für den Anteil p des Merkmales in der untersuchten Population wurde in Beispiel 3.1 angegeben. Aus der Modellgleichung (10) erhält man unter Anwendung der Regeln der Unsicherheitsfortpflanzung für die messtechnisch bedingte Varianz $u^2_M(p)$ die Gleichung (29).

$$u^2_M(p) = u^2(n_s) / n^2 + n_s^2 \cdot u^2(n) / n^4 \quad (29)$$

Geht man davon aus, dass die Gesamtzahl der Blätter des untersuchten Triebes fehlerfrei gezählt wird, so gilt für die Varianz von n die Relation $u^2(n) = 0$. Der Term $u^2(n_s)$ beschreibt das Quadrat der Standardunsicherheit bei der Feststellung der Anzahl n_s der schadhafte Blätter. Um die Varianz $u^2(n_s)$ zu bestimmen, kommen folgende Vorgehensweisen in Frage:

- (a) Die Anzahl n_s der schadhafte Blätter eines vorgegebenen Triebes wird wiederholt und unabhängig voneinander durch k verschiedene Personen ermittelt mit den Resultaten $n_s(i)$ für $i=1, \dots, k$. Die gesuchte Varianz ist gegeben durch:

$$u^2(n_s) = \sum_{i=1}^k [n_s(i) - \langle n_s \rangle]^2 / [k-1]. \quad (30)$$

Hier beschreibt n_s den Mittelwert der Resultate $n_s(i)$.

- (b) Es ist zu erwarten, dass die Anzahl n_s der schadhafte Blätter klein ist im Vergleich zur Gesamtzahl N der Blätter am betrachteten Trieb. Dies führt zu der Annahme, dass n_s einer Poisson-Verteilung folgt. In diesem Fall ist die gesuchte Varianz gegeben durch $u^2(n_s) = n_s$.

Wird der ermittelte Anteil $p = n_s/n$ als Schätzwert für den Anteil der schadhafte Blätter am gesamten Baum herangezogen, so ist ein weiterer Anteil $u^2_{\text{RS}}(p)$ zu berücksichtigen, der durch den Stichprobencharakter der Untersuchung hervorgerufen wird. Das Quadrat der (kombinierten) Standardunsicherheit $u(p)$ des Schätzwertes $p = n_s/n$ ist damit gegeben durch die Relation (31).

$$u^2(p) = u^2_M(p) + u^2_{\text{RS}}(p) \quad (31)$$

Die Ermittlung des Beitrages der unvollständigen Erfassung der untersuchten Population zur Standardunsicherheit von p wird im Beispiel 3.3 beschrieben.

Beispiel 4.2: Ermittlung des p.100-Perzentils aus einer Stichprobe.

Gegeben sei eine zufällige Stichprobe des Merkmalswertes X vom Umfang n aus einer endlichen Population vom Umfang N . Ein Schätzwert für den Perzentilwert X_p der untersuchten Population wurde in Beispiel 4.1 angegeben. Die Varianz des

Schätzwertes X_p als Maß für seine Unsicherheit setzt sich aus einem messtechnisch bedingten Anteil $u^2_M(X_p)$ und einem erhebungsbedingten Anteil $u^2_{RS}(X_p)$ gemäß Gleichung (32) zusammen.

$$u^2(X_p) = u^2_M(X_p) + u^2_{RS}(X_p) \quad (32)$$

Wurden die Messwerte $X(i)$ der zugrunde liegenden Messreihe mit Hilfe einer geradlinigen Modellgleichung vom Typ (1) bestimmt, so kann der messtechnisch bedingte Anteil angegeben werden durch Gl. (33).

$$u^2_M(X_p) = u^2(c_0) \cdot K + b^2 \cdot [u^2(y) / (n_w \cdot K) + u^2(Y_p)] + u^2(b) \cdot [X_p - a]^2 / b^2 \quad (33)$$

Im Vergleich mit Gleichung (24) erkennt man, dass Gleichung (33) die Standardunsicherheit eines einzelnen Messwertes beschreibt. Die Ermittlung des Beitrages der unvollständigen Erfassung der untersuchten Population zur Standardunsicherheit von X_p wird im Beispiel 4.3 beschrieben.

4 Unsicherheit von Schlussfolgerungen

In der Regel weisen umweltbezogene Untersuchungen räumliche und zeitliche Begrenzungen auf. Die zu bewertenden räumlichen und zeitlichen Strukturen der Messobjekte werden vielfach aus Aufwandsgründen nicht vollständig, sondern nur stichprobenartig untersucht. In derartigen Fällen werden Schlussfolgerungen erforderlich, um die Messergebnisse auf andere als die untersuchten Einheiten zu übertragen. Die Validität einer derartigen Schlussfolgerung kann bewertet werden, wenn die Schlussfolgerung durch ein statistisches Modell unterstützt wird, welches neben der Schlussfolgerung auch eine Abschätzung ihrer Unsicherheit gestattet. Diese Unsicherheit wird bestimmt durch die Repräsentativität der untersuchten Objekte für die nicht untersuchten beziehungsweise für eine gesamte Population von interessierenden Objekten. Eine untersuchte Stichprobe ist repräsentativ für eine zu bewertende Menge (Population) von Objekten, wenn die interessierenden Eigenschaften der Menge (Population) aus der Stichprobe unverzerrt und innerhalb bekannter Unsicherheitsgrenzen erschlossen werden können. Die Unsicherheit einer Schlussfolgerung ist mithin Ausdruck der begrenzten zeitlichen beziehungsweise räumlichen Repräsentativität der zugrunde liegenden Stichprobe von Erhebungsdaten. Eine Auswahl von Methoden zur Beschreibung der zeitlichen und der räumlichen Repräsentativität von Stichprobenergebnissen in diesem Sinne findet sich in den Abschnitten 4.1 und 4.2. Eine allgemein anwendbare Vorgehensweise zur Analyse der Repräsentativität von Stichproben sowie der Unsicherheit von abgeleiteten Schlussfolgerungen wird in Abschnitt 4.3 vorgestellt. Diese Methodik ist unter anderem auch dazu geeignet, die Zufälligkeit von Stichproben zu überprüfen.

4.1 Zeitliche Repräsentativität

Die zeitliche Repräsentativität von Umweltdaten wird bestimmt (a) durch die zeitliche Struktur der Untersuchungsobjekte und (b) durch die Verteilung der Messungen über den zu bewertenden Zeitraum. Es werde vorausgesetzt, dass die Untersuchungsobjekte eine zeitliche Veränderlichkeit aufweisen. In diesem Fall wird ein Höchstmaß an zeitlicher Repräsentativität erreicht, wenn die zeitliche Erfassung des Untersuchungsgegenstandes an den interessierenden Messorten lückenlos erfolgt. Ein geringeres Maß an zeitlicher Repräsentativität wird erreicht, wenn die zeitliche Erfassung Lücken aufweist. Eine einfache Bewertung der zeitlichen Repräsentativität ist möglich, wenn die Lücken in der zeitlichen Erfassung zufällig verteilt sind und der zu bewertende Zeitraum endlich ist. In diesem Fall können die Erhebungsdaten als zufällige Stichprobe aus einer zu endlichen Population betrachtet werden. Für die Anwendbarkeit der nachfolgend beschriebenen Methoden ist außerdem sicherzustellen, dass durch die benutzte Messtechnik keine Abhängigkeiten (Korrelationen) in aufeinanderfolgenden Messwerten induziert werden. In den nachfolgenden vier Beispielen werden exemplarische Anwendungen dieser einfachen Stichprobentheorie vorgestellt.

Beispiel 1.3: Ermittlung von Messwerten mit Hilfe einer geradlinigen Modellgleichung.

Die zeitliche Repräsentativität eines einzelnen Messwertes X der Sammelzeit T_s hängt von der zeitlichen Struktur des Untersuchungsmerkmals ab. Weist das Untersuchungsmerkmal auf der interessierenden Zeitskala T ($> T_s$) keine zeitliche Veränderlichkeit auf, so kann der Messwert X zur Beschreibung des untersuchten Merkmals im gesamten Zeitraum $T > T_s$ herangezogen werden. Ein Beitrag zur Unsicherheit von X ist aus einer derartigen Übertragung nicht abzuleiten. Weist das Untersuchungsmerkmal dagegen auf der Zeitskala $T > T_s$ eine deutliche zeitliche Struktur auf, so weist ein Messwert der Sammelzeit $T_s < T$ keine Repräsentativität für den Zeitraum T auf.

Beispiel 2.3: Ermittlung des arithmetischen Mittelwertes aus einer Stichprobe.

Gegeben sei eine zufällige Stichprobe bestehend aus n unabhängig voneinander registrierten Werten $X(i)$ mit $i = 1, \dots, n$ aus einer endlichen Population (Zeitreihe) vom Umfang N . Ein Schätzwert für den Mittelwert X_M der untersuchten Population wurde in Beispiel 2.1 angegeben. Der messtechnisch bedingte Anteil der Varianz dieses Schätzwertes wurde in Beispiel 2.2 beschrieben. Gesucht werde der erhebungsbedingte Beitrag $u^2_T(X_M)$ zur Unsicherheit des Mittelwertes X_M der Stichprobe. Entsprechend der statistischen Theorie (HARTUNG 1985) ist der gesuchte Beitrag gegeben durch Gleichung (34).

$$u^2_T(X_M) = s^2(X) \cdot [1 - n/N] / n \quad (34)$$

$s(X)$ beschreibt hier die Standardabweichung der Messwerte gegeben durch Gleichung (35).

$$s(X) = \sqrt{\sum_{i=1}^n [X(i) - X_M]^2 / [n-1]} \quad (35)$$

Im Fall einer vollständigen Messreihe mit $n = N$ ist ein Höchstmaß zeitlicher Repräsentativität des arithmetischen Mittelwertes $\bar{X}_M$ für den Bewertungszeitraum gegeben durch $u^2_T(\bar{X}_M) = 0$. Gleichung (29) liefert eine zufrieden stellende Beschreibung der Repräsentativität des Mittelwertes $\bar{X}_M$ einer Stichprobe, die aus einer endlichen Zeitreihe von Messwerten entnommen wurde. Gleichung (34) ist gültig, solange die Messwerte $X(i)$ der Stichprobe als unabhängig voneinander betrachtet werden können. Dies impliziert die Gültigkeit der Relation (36).

$$\text{cov}\{X(i), X(j)\} = 0 \text{ für } i \neq j \quad (36)$$

Die Erfüllung dieser Relation kann folgendermaßen demonstriert werden. Definitionsgemäß gilt

$$\text{cov}\{X(i), X(j)\} = E\{[X(i) - E(X(i))] \cdot [X(j) - E(X(j))]\}. \quad (37)$$

Hier beschreibt $E(\cdot)$ den Erwartungswert der Zufallsgröße, die in dem Klammerausdruck $(\cdot)$ angegeben ist. $E(X(i))$ beschreibt folglich den Erwartungswert (wahren Wert) des Merkmalswertes X zum Zeitpunkt i . Sofern der Merkmalswert X im Untersuchungszeitraum eine zeitliche Struktur aufweist, können sich $E(X(i))$ und $E(X(j))$ unterscheiden. Mithin wird die gesuchte Kovarianz nicht durch die untersuchte zeitliche Struktur, sondern durch die eingesetzte Messtechnik bestimmt. Folglich ist es über Auswahl und Überwachung der Messtechnik möglich, sicherzustellen, dass die Bedingung (36) erfüllt ist. Man kann die Gültigkeit der Gleichung (36) auch durch die in Abschnitt 4.3 beschriebene Resampling-Technik überprüfen.

Beispiel 3.3: Ermittlung des Anteiles p aus einer Stichprobe.

Gegeben sei eine zufällige Stichprobe vom Umfang n aus einer endlichen Population vom Umfang N , n_s Einheiten (Blätter) weisen ein interessierendes Merkmal (Schadbild) auf. Ein Schätzwert für den Anteil p des Merkmales in der untersuchten Population wurde in Beispiel 3.1 angegeben. Die Ermittlung des messtechnisch bedingten Anteiles $u^2_M(p)$ der Varianz von p wurde in Beispiel 3.2 beschrieben. Im Folgenden wird die durch den Stichprobencharakter hervorgerufene Unsicherheit betrachtet. Eine empirische Wahrscheinlichkeit p , die aus einer Stichprobe vom Umfang n aus einer Population vom Umfang N ohne zurücklegen ermittelt wurde, weist eine stichprobenbedingte Varianz auf, die angegeben werden kann durch Gleichung (38) (HARTUNG 1985)

$$\text{var}(p) = 1/n \cdot p \cdot (1 - p) (N - n) / (N - 1). \quad (38)$$

Die stichprobenbedingte Standardunsicherheit der empirischen Wahrscheinlichkeit p beträgt in diesem Fall also

$$u_{RS}(p) = \sqrt{\text{var}(p)}. \quad (39)$$

In Tabelle 1 sind einige Beispiele zusammengestellt. Möchte man beispielsweise den Stichprobenumfang ermitteln, der erforderlich ist, um ein Ereignis, dessen Häufigkeit bei 50 Prozent liegt mit einer Standardabweichung von höchstens 5 Prozent zu bestimmen, so sind dazu entsprechend Tabelle 1 Stichproben von einem Umfang $n = 104$ hinreichend.

Tabelle 1: Standardunsicherheit $u_{RS}(p)$ für Stichproben aus einer Population vom Umfang $N = 365$ gemäß Gleichung (39).

p	$n = 13$	$n = 52$	$n = 104$
0,01	0,027	0,013	0,008
0,02	0,039	0,019	0,014
0,05	0,061	0,030	0,021
0,10	0,08	0,04	0,03
0,20	0,11	0,06	0,04
0,30	0,13	0,06	0,04
0,40	0,14	0,07	0,05
0,50	0,14	0,07	0,05

Beispiel 4.3: Ermittlung des p .100-Perzentils aus einer Stichprobe.

Gegeben sei eine zufällige Stichprobe des Merkmalswertes X vom Umfang n aus einer endlichen Population vom Umfang N . Ein Schätzwert für den Perzentilwert X_p der untersuchten Population wurde in Beispiel 4.1 angegeben. Die Ermittlung der messtechnisch bedingten Unsicherheit des Schätzwertes X_p wurde in Beispiel 4.2 beschrieben. Die stichprobenbedingte Unsicherheit des Schätzwertes X_p kann für $n > 20$ durch die Varianz $\text{var}(k)$ des geschätzten Rangplatzes k wie folgt angegeben werden (BENNETT & FRANKLIN 1963):

$$\text{var}(k) = n \cdot p \cdot (1 - p)(N - n) / (N - 1) \quad (40)$$

In Tabelle 2 sind einige Beispiele für die Ermittlung der Standardabweichung des Rangplatzes k des p .100-Perzentils zusammengestellt für den Fall $n \ll N$.

Tabelle 2: Standardabweichung $s(k) = \sqrt{\text{var}(k)}$ des Rangplatzes k des p .100-Perzentils für $N = 365$.

p	0,5		0,95		0,98	
n	k	$s(k)$	k	$s(k)$	k	$s(k)$
13	7	1,8	13	0,8	13	0,5
26	14	2,5	25	1,1	26	0,7
52	27	3,3	50	1,5	51	0,9
104	53	4,3	99	1,9	102	1,2
208	105	4,7	198	2,1	204	1,3
312	157	3,4	297	1,5	306	0,9
365	183	0,0	347	0,0	358	0,0

Eine Abbildung dieser Ergebnisse auf die Merkmalskala wird möglich durch folgende Rechenvorschrift:

$$s(X_p) = 0,5 \cdot [X(k_o) - X(k_u)] \quad (41)$$

mit den Rangzahlen $k_o = \text{INT}(k + s(k)) + 1$ und $k_u = \text{INT}(k - s(k))$, wobei gilt $k = \text{INT}(n \cdot p) + 1$.

Mit $s(X_p)$ liegt eine Näherungslösung für die Standardabweichung des Perzentilschätzers X_p vor. Allgemeingültige Lösungen für Vertrauensgrenzen von Perzentilschätzern lassen sich mit Hilfe der Binomialverteilung angeben (BÜNING & TRENKLER 1978).

4.2 Räumliche Repräsentativität

Die räumliche Repräsentativität von Umweltdaten wird bestimmt (a) durch die räumliche Struktur der Untersuchungsobjekte und (b) durch die Verteilung der Messorte in dem zu bewertenden Gebiet. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass das Untersuchungsobjekt im interessierenden Gebiet eine räumliche Struktur aufweist, die es zu untersuchen gilt. In diesem Fall wird ein Höchstmaß an räumlicher Repräsentativität erreicht durch eine räumliche lückenlose Erfassung der Untersuchungsobjekte im zu bewertenden Gebiet. Wenn die räumliche Erfassung dagegen Lücken aufweist, was aus Aufwandgründen der Regelfall sein wird, so ist zwangsläufig nur ein geringeres Maß an räumlicher Repräsentativität erreichbar. Eine statistische Bewertung der räumlichen Repräsentativität von Untersuchungsergebnissen wird möglich, wenn die Lücken in der räumlichen Erfassung zufällig verteilt sind. In diesem Fall können die Erhebungsdaten als zufällige Stichproben aus einer räumlich verteilten Population betrachtet werden. Für die Anwendbarkeit der nachfolgend beschriebenen Methoden wird vorausgesetzt, dass durch die benutzte Messtechnik keine Abhängigkeiten (Korrelationen) zwischen Messergebnissen benachbarter Messorte induziert werden. Im Allgemeinen können folgende Anwendungsfälle unterschieden werden:

- (a) Schätzung von Eigenschaften einer endlichen Population räumlicher Einheiten, die durch Ähnlichkeitsmerkmale definiert ist, aus einer räumlich verteilten Stichprobe.
- (b) Schätzung lokaler Merkmale in einem zusammenhängenden Gebiet aus räumlich verteilten Stichproben (Räumliche Interpolation).

In Fällen vom Typ (a) können die in Abschnitt 4.1 beschriebenen Methoden zur Anwendung kommen. Die gewählte Stichprobe umfasst n unabhängige räumliche Einheiten und bildet eine Zufallsauswahl aus einer interessierenden Population vom Umfang N . Im Fall (b) ist das interessierende Merkmal lokal also auch zwischen Messorten aus einem Messnetz endlicher räumlicher Dichte zu schätzen. Dies geschieht in der Regel durch räumliche Interpolation. Die Unsicherheit einer räumlichen Interpolation wird bestimmt durch die Stichprobeneigenschaften der Erhebungsdaten.

Methoden zur Interpolation räumlich verteilter Daten sind in Lehrbüchern der Geostatistik und der Meteorologie beschrieben (CRESSIE 1993; DUTTER 1985; HOSCHEK & LASSER 1989; RIPLEY 1981; THIEBAUX & PEDDER 1987). Methoden der räumlichen Interpolation lassen sich in der Regel als Prozesse der gewichteten Flächenmittelung beschreiben. Grundlage dieses Ansatzes ist die Modellvorstellung, dass der gesuchte Merkmalswert $C'(x)$ am Ort x in einem festen Verhältnis zu den beobachteten Merkmalswerten $C(x_i)$ der nächstgelegenen Messorte x_i steht. Gegeben sei ein Satz von Merkmalswerten $C(x_i)$ mit $i=1, \dots, N$, die an N Messorten x_i innerhalb eines zusammenhängenden Beurteilungsgebietes messtechnisch ermittelt wurden. Dabei wird vorausgesetzt, dass die Messorte x_i eine repräsentative Stichprobe aller möglichen Messorte im Beurteilungsgebiet darstellen. Gesucht wird der Merkmalswert $C'(x)$ an einem beliebigen Ort

x des Beurteilungsgebietes. Eine allgemeine Lösung ist gegeben durch die Rechenvorschrift (42).

$$C'(x) = \sum_{i=1}^N C(x_i) \cdot g(x, x_i) / \sum_{i=1}^N g(x, x_i) \quad (42)$$

Hier beschreibt $g(x, x_i)$ das lokale Gewicht, mit dem der am Messort x_i beobachtete Merkmalswert $C(x_i)$ bei der Ermittlung des gesuchten Merkmalswertes $C'(x)$ am Ort x berücksichtigt wird. Die Gewichtsfunktion $g(x, x_i)$ kann Werte zwischen Null und Eins annehmen. Der Schätzwert $C'(x)$ ist folglich der gewichtete Mittelwert derjenigen Merkmalswerte $C(x_i)$, die ein Gewicht $g(x, x_i) > 0$ aufweisen. Mathematisch handelt es sich bei Gl. (42) um ein lokal gewichtetes Regressionsmodell zur Ermittlung einer Ausgleichsfläche in einer dreidimensionalen Punktwolke. Nachfolgend sind einige Möglichkeiten zur Quantifizierung der Unsicherheit einer der beschriebenen räumlichen Modellierung aufgeführt:

- (a) Unsicherheitsfortpflanzung gemäß „Leitfaden“ (DIN 1995),
- (b) Resampling-Studie,
- (c) Ermittlung der Residualvarianz.

Um die Unsicherheitsfortpflanzung gemäß „Leitfaden“ (DIN 1995) untersuchen zu können, ist es erforderlich, die Varianzen und Kovarianzen der Gewichtsfaktoren $g(x, x_i)$ und $g(x, x_j)$ begründet zu beschreiben. Dies setzt Annahmen voraus, die in der Regel nicht oder nur unzureichend begründet werden können. Deshalb kann diese Vorgehensweise nur in gut begründeten Einzelfällen empfohlen werden. Näheres hierzu findet sich beispielsweise in dem umfassenden Werk von CRESSIE (1993).

Mit Hilfe von Resampling-Studien kann untersucht werden, wie sich die modellierte Ausgleichsfläche lokal verändert, wenn einzelne Messorte bei der Interpolation nicht berücksichtigt werden. Diese Vorgehensweise lässt sich für alle Messorte nacheinander und unabhängig voneinander ausführen. Damit lassen sich die Unsicherheiten abschätzen, die durch die unvollständige Erfassung der vorhandenen räumlichen Strukturen durch ein realisiertes Messnetz entstehen. Die Grundidee dieser modernen statistischen Methodik ist in Abschnitt 4.3 beschrieben. Am einfachsten kann die Unsicherheit einer gemäß Gl. (42) modellierten Ausgleichsfläche anhand der zugehörigen Residualvarianz beurteilt werden, die gemäß Gl. (43) ermittelt wird.

$$u_s^2(C') = \sum_{i=1}^N [C'(x_i) - C(x_i)]^2 / [N-1] \quad (43)$$

Anstelle der absoluten Residualvarianz $u_s^2(C')$ kann auch die relative Residualvarianz $v_s^2(C')$, die gelegentlich auch Variationskoeffizient genannt wird, gemäß Gl. (44) ermittelt werden.

$$v_s^2(C') = \sum_{i=1}^N [(C'(x_i) - C(x_i)) / C(x_i)]^2 / [N-1] \quad (44)$$

Die Attraktivität der Unsicherheitsmaße (43) und (44) liegt zum einen in ihrer unbestreitbaren Einfachheit, zum anderen in der Analogie zur Residualvarianz bei der Anpassung von Ausgleichsgeraden an Punktwolken im zweidimensionalen

Raum und nicht zuletzt in der Tatsache, dass sie unabhängig von der gewählten lokalen Gewichtsfunktion $g(x, x_i)$ sind. Der Preis für diese Einfachheit besteht in der Tatsache, dass die Unsicherheitsmaße (43) und (44) keine Aussage über die lokale Anpassungsqualität einer ermittelten Ausgleichsfläche an einem beliebigen Aufpunkt x vermitteln.

Bei der Ermittlung der Residualvarianz gemäß Gl. (43) oder des Variationskoeffizienten gemäß Gl. (44) wird vorausgesetzt, dass Kovarianzen zwischen den Merkmalswerten $C(x_i)$ und $C(x_j)$ benachbarter Messorte x_i und x_j vernachlässigt werden können. Die entsprechende Bedingung ist in Gleichung (45) formuliert.

$$\text{cov}\{C(x_i), C(x_j)\} = 0 \text{ für } i \neq j \quad (45)$$

Die Erfüllung dieser Bedingung kann folgendermaßen untersucht werden. Definitionsgemäß ist die interessierende Kovarianz gegeben durch Gleichung (46).

$$\text{cov}\{C(x_i), C(x_j)\} = E\{[C(x_i) - E(C(x_i))] \cdot [C(x_j) - E(C(x_j))]\} \quad (46)$$

Hier beschreibt $E(\cdot)$ den Erwartungswert der Zufallsgröße, die in dem Klammerausdruck $(\cdot)$ angegeben ist. $E(C(x_i))$ beschreibt folglich den Erwartungswert (wahren Wert) des Merkmalswertes C am Messort x_i . Sofern der Merkmalswert C im Untersuchungsgebiet räumliche Strukturen aufweist, ist davon auszugehen, dass der Erwartungswert $E(C(x_i))$ eine Abhängigkeit vom Messort x_i aufweist. Es ist deshalb nicht davon auszugehen, dass der Erwartungswert $E(C(x_i))$ mit dem Erwartungswert $E(C(x_j))$ übereinstimmt. Die Abweichungen der beobachteten Werte $C(x_i)$ vom zugehörigen Erwartungswert $E(C(x_i))$ werden folglich nicht von den vorhandenen räumlichen Strukturen, sondern von der eingesetzten Messtechnik bestimmt. Folglich ist es über Auswahl der Messorte und Überwachung der Messtechnik möglich, sicherzustellen, dass die Bedingung (45) erfüllt ist. Zentraler Punkt der räumlichen Interpolation ist mithin die Auswahl der Gewichtsfunktion $g(x, x_i)$. Nachfolgend werden einige Gewichtsfunktionen vorgestellt.

(a) Lokale Mittelung über kreisförmige Flächen mit ortsunabhängigem Radius R .

Die Gewichtsfunktion ist gegeben durch Gleichung (47).

$$\begin{aligned} g(x, x_i) &= 1 \text{ für } x_i \text{ mit } d(x, x_i) < R \text{ und} \\ g(x, x_i) &= 0 \text{ für } x_i \text{ mit } d(x, x_i) \geq R \end{aligned} \quad (47)$$

Hier beschreibt $d(x, x_i)$ den (euklidischen) Abstand des Messortes x_i vom Aufpunkt x . Bei Verwendung der Gewichtsfunktion (47) liefert die Interpolationsvorschrift (42) für den gesuchten Merkmalswert $C'(x)$ den arithmetischen Mittelwert über die Messorte, welche innerhalb einer kreisförmigen Fläche mit Radius R um den Aufpunkt x liegen. Innerhalb einer derartigen Interpolationsfläche müssen jeweils mindestens zwei Messorte liegen. Dies ist eine angemessene Vorgehensweise, wenn (a) die Messorte x_i im Beurteilungsgebiet mit gleichmäßiger Dichte verteilt sind und (b) die Messorte hinsichtlich der räumlichen Repräsentativität nicht zu unterscheiden sind.

(b) Räumliche Interpolation mit inverser Abstands-Wichtung.

Die Gewichtsfunktion ist gegeben durch Gleichung (48).

$$\begin{aligned} g(x, x_i) &= 1 \text{ für } x_i \text{ mit } d(x, x_i) \leq d_0 \text{ und} \\ g(x, x_i) &= [d_0/d(x, x_i)]^2 \text{ für } x_i \text{ mit } d(x, x_i) \geq d_0 \end{aligned} \quad (48)$$

Hier beschreibt $d(x, x_i)$ den (euklidischen) Abstand des Messortes x_i vom Aufpunkt x . Durch die Festlegung des Referenzabstandes d_0 wird eine kreisförmige Kernzone um den Messort x_i festgelegt, (a) in welche der Messwert $C(x_i)$ ohne Interpolation übertragen wird und (b) wie schnell die Gewichtsfunktion mit dem Abstand abfällt.

(c) Räumliche Interpolation unter Berücksichtigung von Messorten unterschiedlicher Repräsentativität.

Von BEIER & DOPPELFELD (1999) wurde die in Gleichung (49) angegebene einfache Gewichtsfunktion vorgeschlagen, um Unterschiede in der räumlichen Repräsentativität von Messorten zu berücksichtigen:

$$\begin{aligned} g(x, x_i) &= 1 - d(x, x_i) / R(i) \text{ für } d(x, x_i) < R(i) \text{ und} \\ g(x, x_i) &= 0 \text{ für } d(x, x_i) \geq R(i) \end{aligned} \quad (49)$$

Hier beschreibt $d(x, x_i)$ den (euklidischen) Abstand des Messortes x_i vom Aufpunkt x . Das Gewicht $g(x, x_i)$, mit welchem der Messort am Ort x_i bei der Ermittlung des Merkmalswertes $C'(x)$ berücksichtigt wird, ist bestimmt durch

- den räumlichen Abstand $d(x, x_i)$ des Messortes x_i vom Aufpunkt x und durch
- den Einflussradius $R(i)$ des Messortes x_i .

Für den interessierenden Merkmalswert, der räumlich interpoliert werden soll, ist jedem Messort x_i des betrachteten Messnetzes ein Einflussradius $R(i)$ zuzuordnen. Die Einflussradien $R(i)$ dienen dazu, das vorhandene Wissen über Unterschiede in der räumlichen Repräsentativität der Messorte in möglichst einfacher Form zu beschreiben. Die Bedeutung des Einflussradius besteht darin, festzulegen, bis zu welchem Abstand der Messort am Ort x_i bei der Interpolation am Ort x berücksichtigt werden soll. Weitergehende Analysen der räumlichen Repräsentativität von Messnetzen zur Untersuchung der Luftqualität wurden von BEIER & DOPPELFELD (1989) und (1992) publiziert.

Beispiel 1.5: Ermittlung der räumlichen Verteilung von Ozon 1-Stundenwerten in Nordrhein-Westfalen

Anwendung findet die Gewichtsfunktion (49) mit den in Tabelle 3 angegebenen Einflussradien für die Messorte in Nordrhein-Westfalen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 1 dargestellt.

Tabelle 3: Einflussradien für Schwefeldioxid

Typ	Beschreibung	R(i) in km
T	Verkehrsnaher Messort	1,5
I	Industrienaher Messort	2
U	Messorte im urbanen Hintergrund	10
R	Ländliche Messorte	20

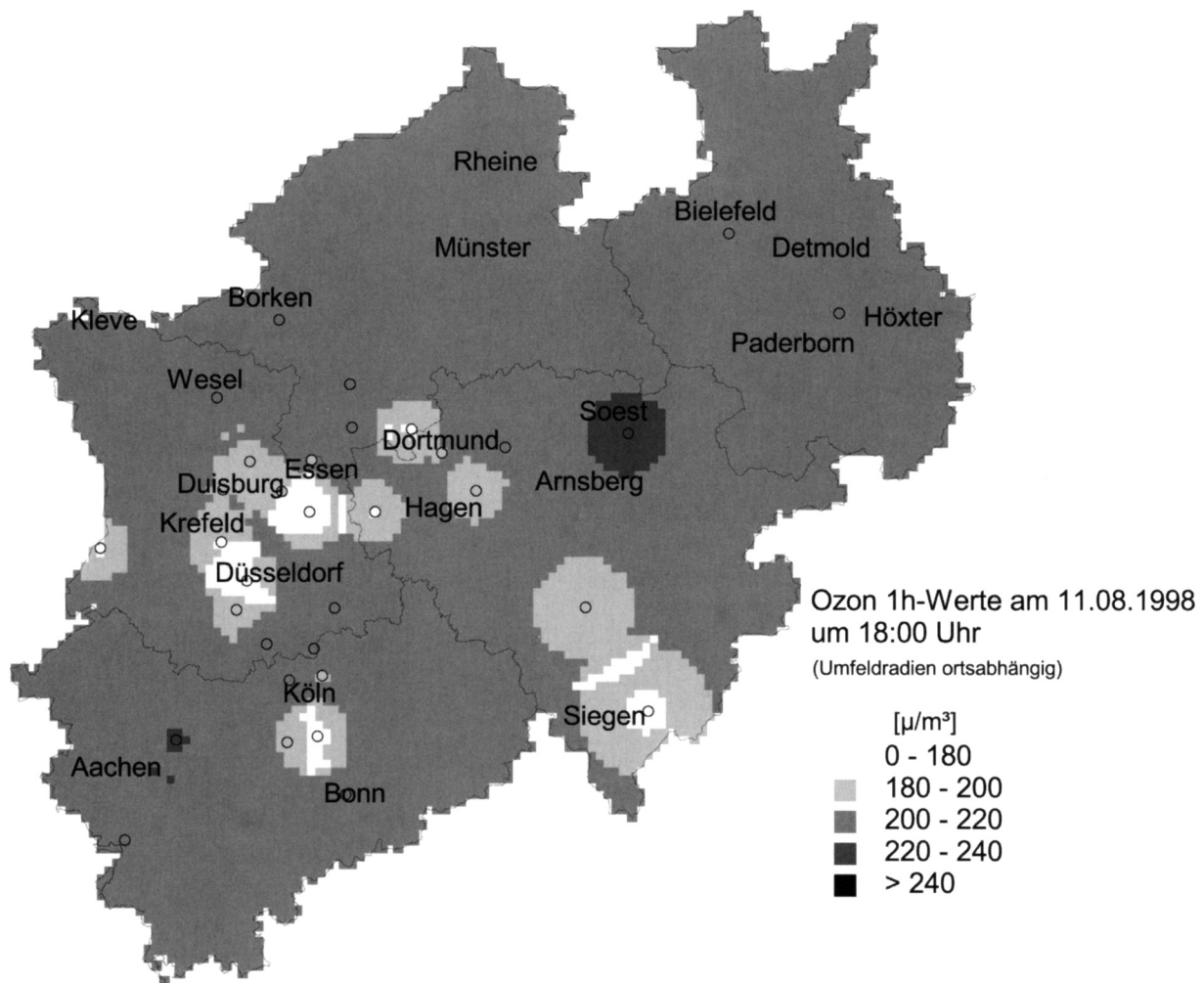


Abb. 1: Gleitende Flächenmittelung mit Gewichtsfunktion (49). Daten: Ozon 1-Stundenwert in Nordrhein-Westfalen. Variationskoeffizient $v_s(C^*) = 0,02$.

Beispiel 2.5: Ermittlung des arithmetischen Mittelwertes von Schwefeldioxid mittels räumlicher Interpolation

Anwendung findet die Gewichtsfunktion (49) mit den in Tabelle 3 angegebenen Einflussradien für die Messorte in Nordrhein-Westfalen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 2 zusammengestellt.

Beispiel 3.5: Anzahl der Überschreitungen des Wertes 180 µg/m³ durch 1-Stundenwerte von Ozon im Jahr 1998

Anwendung findet die Gewichtsfunktion (49) mit den in Tabelle 3 angegebenen Einflussradien für die Messorte in Nordrhein-Westfalen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3 zusammengestellt.

4.3 Resampling

Die Verbreitung elektronischer Rechenanlagen hat der Statistik nahezu grenzenlose Möglichkeiten zur Simulation

von stichprobenartigen Erhebungen aus definierten Populationen von Untersuchungsobjekten gegeben. Der Kern der Methodik besteht darin, dass aus einem repräsentativen Satz von Untersuchungsdaten mit Hilfe eines Computer-Programmes nach einem festgelegten Stichprobenplan wiederholt und unabhängig voneinander Stichproben des gewünschten Umfanges entnommen werden. Dadurch lassen sich Häufigkeitsverteilungen auch von komplexen Stichprobenkenngrößen empirisch ermitteln und bewerten (EFRON 1982, SPRENT 1989). Dieses Instrumentarium kann auch genutzt werden, um die Unsicherheit eines statistischen Modells, das für eine Schlussfolgerung herangezogen werden soll, zu ermitteln. Dies setzt allein die Verfügbarkeit einer repräsentativen Stichprobe von Untersuchungsdaten voraus.

Die messtechnisch ermittelte Stichprobe sei gegeben durch Gleichung (50).

$$X(1), X(2), \dots, X(N) \quad (50)$$

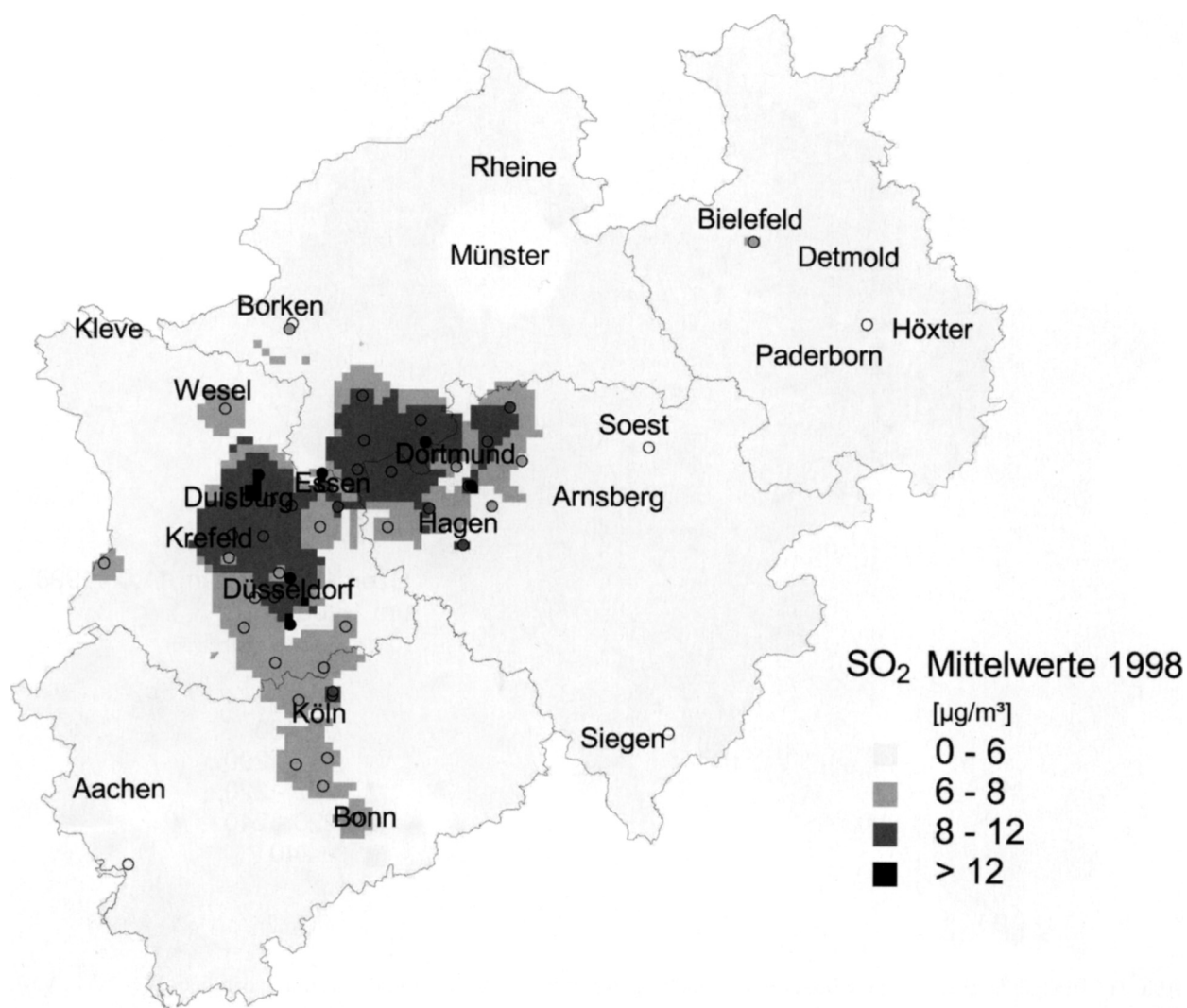


Abb. 2: Gleitende Flächenmittelung mit Gewichtsfunktion (49). Daten: Schwefeldioxid-Jahresmittelwert 1998. Variationskoeffizient $v_s(C') = 0,10$.

Die Stichprobe (50) sei repräsentativ für die zu bewertende Population. Aus dieser realen Messreihe werden mit Hilfe eines Rechenprogramms virtuelle Stichproben von geringerem Umfang gezogen. Zu diesem Zweck werden $n < N$ gleichverteilte Zufallszahlen z aus dem Intervall $[1, N]$ erzeugt. Diese seien gegeben durch $\{z_1, z_2, \dots, z_n\}$. Die zugehörige virtuelle Stichprobe S_1 ist gegeben durch Gleichung (51).

$$S_1 = \{X(z_1), X(z_2), \dots, X(z_n)\} \quad (51)$$

Bei der Erzeugung gleichverteilter Zufallszahlen können folgende Vorgehensweisen unterschieden werden:

- (a) Erzeugung gleichverteilter Zufallszahlen mit Wiederholung oder
- (b) Erzeugung gleichverteilter Zufallszahlen ohne Wiederholung.

Bei Anwendung der Methode (a) kann ein Messwert aus der Stichprobe (50) wiederholt in eine bestimmte virtuelle Stich-

probe aufgenommen werden. Bei Anwendung der Methode (b) kann dagegen ein Messwert aus der Stichprobe (50) nur einmal in dieselbe virtuelle Stichprobe gelegt werden. Grundsätzlich wird hier die Anwendung der Methode (b) empfohlen. Auf diese Art und Weise werden eventuell vorhandene zeitliche oder räumliche Strukturen und Abhängigkeiten in den virtuellen Stichproben abgebildet.

Die gewählte Prozedur (b) zur Ziehung einer Stichprobe vom Umfang n aus der gegebenen Stichprobe kann nun so oft wiederholt werden, wie es zur Beurteilung der statistischen Eigenschaften der interessierenden Stichproben-Kenngröße C erforderlich erscheint. Es wird empfohlen, für einen interessierenden Stichprobenumfang n mindestens 100 Wiederholungstichproben zu ziehen. Aus jeder erzeugten virtuellen Stichprobe wird die interessierende Kenngröße $C(S_i)$ ermittelt. So erhält man beispielsweise eine Menge von 100 simulierten Werten der interessierenden Stichproben-Kenngröße C .

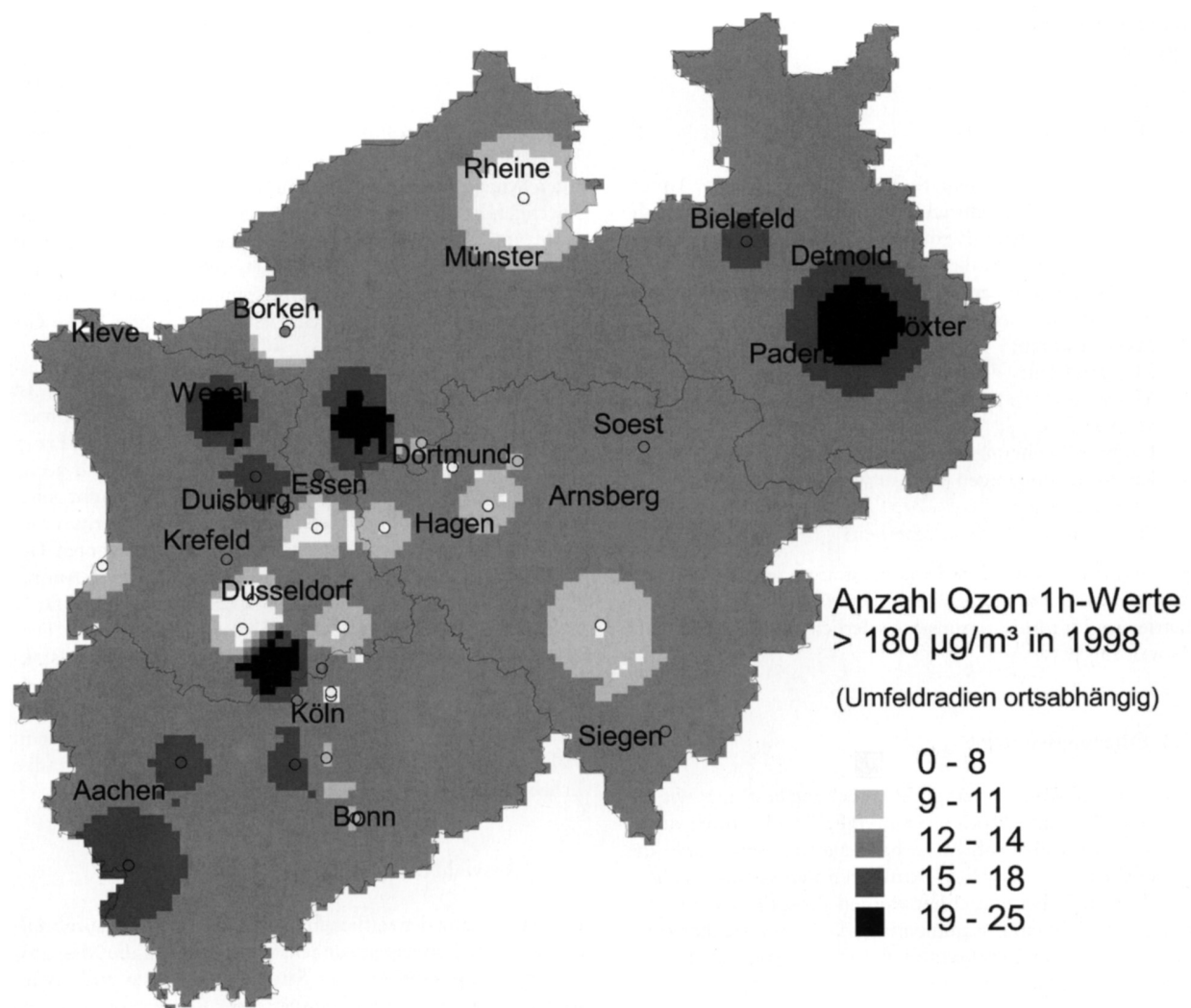


Abb. 3: Gleitende Flächenmittelung mit Gewichtsfunktion (49). Daten: Anzahl der Überschreitungen des Ozon-Wertes 180 µg/m³ im Jahr 1998. Variationskoeffizient $v_s(C') = 0,18$.

$$\{C(S_1), C(S_2), \dots, C(S_{100})\}$$

Damit erhält man eine Abbildung der Häufigkeitsverteilung der betrachteten Stichproben-Kenngröße C . Die Standardabweichung dieser Häufigkeitsverteilung ist ein Maß für die Unsicherheit der betrachteten Stichprobenkenngröße C . Die beschriebene Resampling-Methode (b) ist für Kenngrößen wie Mittelwerte, Anteile und Perzentile anwendbar.

5 Untersuchungsplanung

Die Qualität von Ergebnissen umweltbezogener Untersuchungen kann durch eine systematische Planung der Erhebungen nachhaltig gesteuert werden. Ziel einer systematischen Untersuchungsplanung ist es, die vorgelegte Aufgabenstellung zu analysieren und auf dieser Basis Festlegungen zu treffen,

- welche Erhebungsverfahren zum Einsatz gelangen sollen,
- welche Erhebungsstrategie Anwendung finden soll und
- welche Methoden der Datenanalyse genutzt werden sollen, um die erhobenen Daten auszuwerten und ihre Qualität zu ermitteln.

Die Planung umweltbezogener Untersuchungen erweist sich als querschnittsbezogene Aufgabe mit gelegentlich hohem Koordinations- und Abstimmungsbedarf. Zu diesem Zweck ist das vorhandene Fachwissen über den Untersuchungsgegenstand mit dem Wissen über verfügbare Messtechnik sowie statistische Erhebungs- und Auswertungsmethoden zusammenzuführen, um Untersuchungsmöglichkeiten für die vorgelegten Fragestellungen vergleichend bewerten und informiert auswählen zu können. Vorhandene umweltrechtliche Bestimmungen und Bewertungsmaßstäbe können bei der Problemanalyse Berücksichtigung finden. In den nachfolgenden Unterabschnitten werden die

erwähnten Elemente der Untersuchungsplanung näher erläutert.

5.1 Erhebungsverfahren

Zur Durchführung systematischer umweltbezogener Untersuchungen sind Messeinrichtungen bzw. Erhebungsverfahren einzusetzen, deren Eignung für die Messaufgabe erwiesen ist. Dies impliziert die Verfügbarkeit folgender Informationen über die in Frage kommenden Messeinrichtungen:

- Name der Messeinrichtung:
- Messverfahren:
- Messgröße(n):
- Messbereich(e):
- Störeinflüsse:
- Kalibrierbedingungen und Referenznormale:
- Kontrollbedingungen und -aufwand:
- Datenerfassung:
- Ermittlung der Messunsicherheit:

Es muss eine vollständige Dokumentation der interessierenden Messeinrichtung verfügbar sein einschließlich der zum Betrieb und zur Kalibrierung erforderlichen Anleitungen und Anweisungen.

5.2 Erhebungsstrategie

Die Erhebungsstrategie einer Untersuchung bestimmt wie die durchzuführenden Messungen räumlich und zeitlich anzuordnen sind. Dabei sollten vorhandene Kenntnisse über die räumlichen bzw. zeitlichen Strukturen der zu untersuchenden Merkmale berücksichtigt werden. Von besonderem Interesse ist in diesem Zusammenhang die Frage, wie die räumliche und zeitliche Repräsentativität von Umweltdaten quantitativ bewertet werden kann.

5.2.1 Auswahl der Messorte

Bei der räumlichen Anordnung der Messungen können verschiedene Methoden zur Anwendung (RIPLEY 1981) kommen. Typische Strategien für diesen Zweck sind die folgenden:

- (a) gezielte Auswahl von Messorten,
- (b) geschichtete Zufallsauswahl von Messorten,
- (c) gleichmäßige Zufallsauswahl von Messorten.

Eine gezielte Auswahl von Messorten (a) kann immer dann vorgenommen werden, wenn es nachvollziehbare Kriterien für eine derartige Auswahl gibt. Im Fall beobachtbarer Effekte wird man sinnvollerweise auf jeden Fall Messungen an solchen Messorten durchführen, an denen die interessierenden Effekte aufgetreten oder zu erwarten sind. Zweckmäßig ist diese Verfahrensweise beispielsweise in Untersuchungen, welche der Beweissicherung dienen.

Eine geschichtete Zufallsauswahl von Messorten (b) ist von Interesse, wenn (vermutete) Einflussfaktoren der interessierenden Messgrößen eine bekannte räumliche Verteilung auf-

weisen. Im Fall der räumlichen Schichtung besteht das Vorgehen darin, das Untersuchungsgebiet in Beurteilungsflächen aufzuteilen, die sich hinsichtlich bestimmter Einflussfaktoren signifikant unterscheiden. Innerhalb jeder so gewählten Schicht sollten die Einflussfaktoren jedoch möglichst geringe Unterschiede aufweisen. Innerhalb einer derartigen Schicht kann dann eine Zufallsauswahl von Messorten durchgeführt werden. Mit einer geschichteten Zufallsauswahl von Messpunkten können Erhebungen durchgeführt werden, die repräsentativ für die untersuchte Verteilung sind, wenn der Anteil der Messpunkte in den einzelnen Schichten dem statistischen Gewicht der Schichten in der Gesamtverteilung entspricht.

Eine gleichmäßige Zufallsauswahl von Messorten (c) ist zweckmäßig, wenn es darum geht, eine repräsentative Untersuchung über eine Häufigkeitsverteilung bestimmter Ereignisse in einem definierten Gebiet durchzuführen und geeignete räumliche Schichtungsmerkmale nicht bekannt sind. Ein Beispiel wäre die Untersuchung der Häufigkeitsverteilung der Niederschlagsmengen in einem ausgedehnten Gebiet ohne größere Erhebungen. Eine rasterförmige Anordnung von Messorten im Raum stellt eine besonders einfache Methode dar, eine räumliche Zufallsauswahl zu treffen. Dies ist jedoch nur solange zutreffend, wie bekannte Einflussfaktoren der Messgrößen nicht dieselbe rasterförmige Verteilung im Raum aufweisen. Da dies jedoch kaum der Fall ist, erweist sich die rasterförmige Anordnung von Messstellen in vielen Fällen als Mittel der Wahl, um flächenrepräsentative Erhebungen durchzuführen.

5.2.2 Auswahl der Messzeiten

Bei der Planung der zeitlichen Verteilung der durchzuführenden Untersuchungen ist zunächst zu fragen, ob die Messgrößen überhaupt eine zeitliche Struktur aufweisen und inwieweit die vorhandene zeitliche Struktur Gegenstand der Untersuchung ist. Ist dies der Fall, so ist zu prüfen, ob eine zeitlich lückenlose messtechnische Erfassung möglich und erforderlich ist. Dies ist sicherlich dann der Fall, wenn die Messergebnisse Eingang in ein Echtzeit-Informationssystem finden, welches der direkten Abwehr und Vermeidung von Schäden dient. Beispiele sind SMOG-Warnsysteme oder Hochwasserinformationssysteme.

In anderen Fällen ist zu prüfen, welche Vorteile eine zeitlich lückenlose messtechnische Erfassung hätte, sofern sie technisch realisierbar ist, und mit welchen Kosten bei lückelloser Erfassung zu rechnen ist. Die Verwendung automatischer Messgeräte führt in der Regel bereits aus betriebstechnischen Gründen zu einem zeitlich nahezu lückenlosen Einsatz der Messgeräte. In vielen Fällen ist eine zeitlich lückenlose Ermittlung von Messwerten sachlich entweder nicht möglich oder nicht geboten. Durch Zufallsauswahl der Messzeiten kann eine repräsentative Erfassung zeitlicher Strukturen erreicht werden.

5.3 Datenanalyse

Bei der Planung systematischer umweltbezogener Untersuchungen ist festzulegen, mit Hilfe welcher Prozeduren die erhobenen Messdaten auszuwerten sind und wie die Qualität der Messergebnisse zu ermitteln und zu bewerten ist. Für die Auswertung von Messdaten finden sich einschlägige Algorithmen in den Beispielen 2.1 bis 2.4.

Zur Beschreibung der Datenqualität von Messergebnissen finden im vorliegenden Beitrag durchgängige Standardunsicherheiten Verwendung. Anstelle der Standardunsicherheit kann auch eine erweiterte Unsicherheit (DIN 1995) zu einem festgelegten Konfidenzniveau benutzt werden, um die Datenqualität eines Messergebnisses zu beschreiben. Die erweiterte Unsicherheit $U_p(X)$ eines Messergebnisses X auf dem Konfidenzniveau p ist definiert als ein Vielfaches der zugehörigen (kombinierten) Standardunsicherheit $u(X)$ gemäß Gleichung (52).

$$U_p(X) = k_p \cdot u(X) \quad (52)$$

Der Erweiterungsfaktor k_p wird bestimmt durch das gewählte Konfidenzniveau p und den effektiven Freiheitsgrad v des Messergebnisses X . Die Ermittlung des effektiven Freiheitsgrades v kann sich im Einzelfall als schwierig erweisen (DIN 1995), sie setzt die Kenntnis der Freiheitsgrade der verschiedenen Beiträge zur Unsicherheit des betrachteten Messergebnisses voraus. Eine Vereinfachung ergibt sich immer dann, wenn es einen dominierenden Beitrag in der Unsicherheitsbilanz gibt. In diesem Fall bestimmt der Freiheitsgrad des dominierenden Unsicherheitsbeitrages den effektiven Freiheitsgrad des Messergebnisses X .

6 Literaturverzeichnis

BEIER, R. & DOPPELFELD, A. (1989): Analyse der räumlichen Repräsentativität automatischer Messnetze der Luftqualität. – Essen (LIS-Berichte Nr. 89, Landesumweltamt NRW, Hrsg.)

BEIER, R. & DOPPELFELD, A. (1992): Räumliche Übertragbarkeit und Interpolation von Luftqualitätsdaten im Messnetz TEMES. – Essen (LIS-Berichte Nr. 101, Landesumweltamt NRW, Hrsg.)

BEIER, R. & DOPPELFELD, A. (1999): Spatial interpolation and representativeness of air quality data – an intuitive ap-

proach, poster presented at: International Conference Air Quality in Europe: Challenges for the 2000s, Venice, Italy, 19–21 May 1999

BEIER, R. & KORDECKI, R. (1999): Estimation of measurement uncertainty of air quality data in case of straight line model equation. – Düsseldorf (VDI Berichte Nr. 1443)

BENNETT, C.A. & FRANKLIN, N.L. (1963): Statistical Analysis in Chemistry and the Chemical Industry. – New York, London

BÜNING, H. & TRENKLER, G. (1978): Nichtparametrische statistische Methoden. – Berlin

CRESSIE, N. (1993): Statistics for spatial data, revised edition. – New York

DIN (1995): Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen. – Berlin (DIN Deutsches Institut für Normung e.V., Hrsg.)

DUTTER, R. (1985): Geostatistik – eine Einführung mit Anwendungen. – Stuttgart

EFRON, B. (1982): The jackknife, the bootstrap and other resampling plans. – Philadelphia (Society for Industrial and Applied Mathematics)

FULLER, W.A. (1981): Measurement error models. – New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore

HARTUNG, J.; ELPELT, B. & KLÖSENER, K.-H. (1985): Statistik Lehr- und Handbuch der angewandten Statistik. – München

HOSCHEK, J. & LASSER, D. (1989): Grundlagen der geometrischen Datenerfassung. – Stuttgart

QUINN, T.J. (1997): Primary methods of measurement and primary standards. In: Metrologia, Vol. 34, S. 61–65

RICHTER, W. & DUBE, G. (1997): Measurement standards and the general problem of reference points in chemical analysis. In: Metrologia, Vol. 34, S. 13–18

RIPLEY, B.D. (1981): Spatial Statistics. – New York

SPRENT, P. (1989): Applied nonparametric statistical methods. – London, S. 203 ff.

THIEBAUX, H.J. & PEDDER, M.A. (1987): Spatial objective analysis: with applications in atmospheric science. – London

