

UMWELT UND GESUNDHEIT

02/2024

Abschlussbericht

Erweiterung der Luftschadstoffprognosen des Umweltbundesamtes

von:

Lina Neunhäuserer, Volker Diegmann
IVU Umwelt GmbH, Freiburg

Herausgeber:

Umweltbundesamt

UMWELT UND GESUNDHEIT 02/2024

Abschlussbericht

Erweiterung der Luftschadstoffprognosen des Umweltbundesamtes

von

Lina Neunhäuserer, Volker Diegmann
IVU Umwelt GmbH, Freiburg

Im Auftrag des Umweltbundesamtes

Impressum

Herausgeber

Umweltbundesamt
Wörlitzer Platz 1
06844 Dessau-Roßlau
Tel: +49 340-2103-0
Fax: +49 340-2103-2285
buergerservice@uba.de
Internet: www.umweltbundesamt.de

Durchführung der Studie:

IVU Umwelt GmbH
Emmy-Noether-Straße 2
79110 Freiburg

Abschlussdatum:

Dezember 2023

Redaktion:

Fachgebiet II 4.2 – Beurteilung der Luftqualität
Stefan Feigenspan

Publikationen als pdf:

<http://www.umweltbundesamt.de/publikationen>

ISSN 1868-4340

Dessau-Roßlau, Juli 2024

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autorinnen und Autoren.

Kurzbeschreibung: Erweiterung der Luftschadstoffprognosen des Umweltbundesamtes

Das UBA betreibt seit einigen Jahren das „Online-Tool Ozonprognose“ für die operationelle Prognose der Luftschadstoffe Ozon und PM₁₀ (ohne verkehrsnah Standorte) auf Basis korrigierter CAMS-Prognosen sowie eine Testumgebung zur Evaluierung der originalen und der korrigierten CAMS-Prognosen mit Hilfe statistischer Kennwerte. Als Korrekturverfahren wird dabei basierend auf Untersuchungen in IVU Umwelt (2018) die Hybrid-Vorhersage verwendet. Im Rahmen des hier beschriebenen Projektes wurden Online-Tool und Testumgebung um den Luftschadstoff NO₂, um die Differenzierung der Prognose bzw. Evaluierung nach Stationstypen sowie um Wochentags- und Feiertagskorrektur als verkehrsspezifische Ergänzungen der Hybrid-Vorhersage erweitert. Es wurde gezeigt, dass die Hybrid-Vorhersage auch bei der Anwendung auf NO₂ und PM₁₀ zu einer Verbesserung der Prognosegüte im Vergleich mit den reinen CAMS-Prognosen führt, und zwar sowohl an Area- als auch an Spot- bzw. Verkehrsstationen. Die Verwendung der Wochentags- und Feiertagskorrektur als Ergänzung der Hybrid-Vorhersage führt zu zusätzlichen Verbesserungen der NO₂-Prognose an verkehrsnahen Standorten.

Ergänzend wurde mit den LM-Delta-Ansätzen ein vielversprechender Ansatz zur Prognose der NO₂-Konzentrationen an verkehrsnahen Messstationen entwickelt, der auf einer multivariaten Regressionsanalyse stündlich aufgelöster Daten mindestens von Windrichtung, Windgeschwindigkeit, Wochentag und Stunde des Tages sowie idealerweise von Kfz-Daten beruht. Vorteil der LM-Delta-Ansätze gegenüber der Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentagskorrektur ist, dass der zeitliche Verlauf der NO₂-Konzentrationen durch die Prognose der LM-Delta-Ansätze im Regelfall besser erfasst wird. Nachteil ist, dass hohe Konzentrationswerte von den LM-Delta-Ansätzen im Regelfall deutlich unterschätzt werden, was sich negativ auf die Standardabweichung und auf die Hit Rate für den betrachteten Schwellenwert von 100 µg/m³ auswirkt. Eine Weiterentwicklung der LM-Delta-Ansätze sollte darauf abzielen, diesen Punkt zu verbessern.

Abstract: Extension of the air pollutant forecasts of the Umweltbundesamt

For several years, the UBA has been operating the "Online Tool Ozone Forecast" for the operational forecast of the air pollutants ozone and PM₁₀ (excluding traffic-related locations) on the basis of corrected CAMS forecasts as well as a test software for evaluating the original and corrected CAMS forecasts using statistical parameters. Based on studies in IVU Umwelt (2018), the hybrid forecast method is used to correct the CAMS forecasts. As part of the project described here, the online tool and test software were expanded to include the air pollutant NO₂, the differentiation of the forecast and evaluation according to station types and the weekday and public holiday correction as traffic-specific extensions to the hybrid forecast method. It was shown that the hybrid forecast method also leads to an improved forecast quality when applied to NO₂ and PM₁₀ compared to the pure CAMS forecasts, both at area and spot or traffic-related air quality stations. The use of the weekday and public holiday correction with the hybrid forecast method provides additional improvements to NO₂ forecasts at traffic-related locations.

In addition, a promising procedure for the prediction of NO₂ concentrations at traffic-related air quality monitoring stations was developed with the LM-Delta approaches, which are based on a multivariate regression analysis of hourly resolved data of at least wind direction, wind speed, day of the week and hour of the day and ideally of traffic data. The advantage of the LM-Delta approaches compared to the hybrid forecast without and with weekday correction is that the temporal development of the NO₂ concentrations is generally better captured by the forecast of the LM-Delta approaches. The disadvantage is that high concentration values are usually significantly underestimated by the LM-Delta approaches, which has a negative effect on the

standard deviation and on the hit rate for the considered threshold value of $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Further development of the LM-Delta approaches should aim to improve this point.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	9
Tabellenverzeichnis	18
Abkürzungsverzeichnis.....	23
1 Einführung	24
2 Vorgehensweise.....	26
3 Eingangsdaten.....	28
3.1 Messdaten	28
3.2 Modelldaten	28
4 Korrekturverfahren	29
4.1 Hybrid-Vorhersage	29
4.2 Wochentagskorrektur	31
4.3 Feiertagskorrektur	34
4.4 Lineare Modelle	41
4.4.1 Allgemeines	41
4.4.2 Prognose der NO ₂ -Konzentration	41
4.4.3 Prognose der Differenzen zwischen den CAMS-Prognosen und der NO ₂ - Konzentration	43
4.4.4 Kombination verschiedener Linearer Modelle	45
5 Verwendete Evaluierungsansätze.....	47
5.1 Statistische Kennwerte.....	47
5.2 DELTA-Tool	50
6 Aufbau der Testumgebung	56
7 Evaluierung der Hybrid-Vorhersage.....	60
7.1 PM ₁₀ : Area-Stationen, Bezugsjahr 2019	60
7.2 PM ₁₀ : Spot-Stationen.....	73
7.2.1 Bezugsjahr 2019	73
7.2.2 Bezugsjahr 2016	85
7.3 NO ₂ : Area-Stationen, Bezugsjahr 2019.....	96
7.4 NO ₂ : Verkehrsstationen, Bezugsjahr 2019	110
7.5 Fazit	124
8 Evaluierung der Wochentagskorrektur	127
8.1 PM ₁₀ : Spot-Stationen.....	127
8.2 NO ₂ : Verkehrsstationen.....	134

8.3	Fazit	142
9	Evaluierung der Feiertagskorrektur	144
9.1	NO ₂ : Verkehrsstationen.....	144
9.2	Fazit	153
10	Evaluierung der Linearen Modelle	154
10.1	Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee	154
10.1.1	Eingangsdaten.....	154
10.1.2	Windgeschwindigkeit, Windrichtung und Verkehr aus Beobachtungsdaten	155
10.1.2.1	Prognose der NO ₂ -Konzentration.....	155
10.1.2.2	Prognose der Differenzen zwischen den CAMS-Prognosen und der NO ₂ -Konzentration	158
10.1.2.3	Kombination verschiedener Linearer Modelle	162
10.1.3	Typisierte Verkehrsganglinie	164
10.1.4	Windgeschwindigkeit und Windrichtung aus MOSMIX-Prognosen.....	168
10.2	Station DEBE063 Berlin Silbersteinstraße	171
10.3	Station DEBW098 Mannheim Friedrichsring	175
10.4	Station DEBW116 Stuttgart Hohenheimer Straße	180
10.5	Station DEBW152 Heilbronn Weinsberger Straße Ost.....	185
10.6	Station DEBY119 Würzburg Stadtring Süd.....	190
10.7	Fazit	195
11	Zusammenfassung und Ausblick.....	197
12	Quellenverzeichnis.....	200

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Beispiel für die Behandlung negativer korrigierter Modellwerte: Scatterplots für mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen für NO ₂ . Links: Untere Schranke von 0 µg/m ³ . Rechts: Verwendung unkorrigierter CAMS-Prognosen.....	30
Abbildung 2:	Wochentagsgemittelte Korrekturwerte der Hybrid-Vorhersage für die stündlichen NO ₂ -Zeitreihen der CAMS-Prognose, 2019, am Beispiel einiger verkehrsnaher Messstandorte.....	32
Abbildung 3:	Wochentagsgemittelte Korrekturwerte der Hybrid-Vorhersage für die stündlichen PM ₁₀ -Zeitreihen der CAMS-Prognose, 2019, am Beispiel einiger verkehrsnaher Messstandorte	34
Abbildung 4:	Konzentrationsniveau der Tagesmittelwerte der NO ₂ -Messdaten 2019 an verkehrsnahen Messstationen in Abhängigkeit vom Tagestyp und unterteilt nach Wochentag und Wochenende, beispielhaft für Baden-Württemberg (oben), Niedersachsen (Mitte) und Sachsen (unten).	36
Abbildung 5:	Konzentrationsniveau der Tagesmittelwerte der PM ₁₀ -Messdaten 2019 an verkehrsnahen Messstationen in Abhängigkeit vom Tagestyp und unterteilt nach Wochentag und Wochenende, beispielhaft für Baden-Württemberg (oben), Niedersachsen (Mitte) und Sachsen (unten).	37
Abbildung 6:	Konzentrationsniveau der Tagesmittelwerte der NO ₂ -CAMS-Prognosedaten 2019 an verkehrsnahen Messstationen in Abhängigkeit vom Tagestyp und unterteilt nach Wochentag und Wochenende, beispielhaft für Baden-Württemberg (oben), Niedersachsen (Mitte) und Sachsen (unten).	38
Abbildung 7:	Konzentrationsniveau der Tagesmittelwerte der PM ₁₀ -CAMS-Prognosedaten 2019 an verkehrsnahen Messstationen in Abhängigkeit vom Tagestyp und unterteilt nach Wochentag und Wochenende, beispielhaft für Baden-Württemberg (oben), Niedersachsen (Mitte) und Sachsen (unten).	39
Abbildung 8:	Beispielhafte Darstellung eines Soccer-Plots, der den Fractional Gross Error aufgetragen zeigt über den Mean Fractional Bias (PM ₁₀ , Area-Stationen, 2019).....	49
Abbildung 9:	Beispielhafte Darstellung der vier Quadranten A – D zur Bestimmung der Metriken zur Bewertung von Schwellenwertüberschreitungen. Näheres siehe Text.....	50
Abbildung 10:	Beispiel für einen Assessment Target Plot des DELTA-Tools ...	52
Abbildung 11:	Beispiel für einen Forecast Target Plot des DELTA-Tools	54
Abbildung 12:	Beispiel für eine dynamische Evaluierung Tag - Nacht des DELTA-Tools	55
Abbildung 13:	Ablaufschema Testumgebung.....	57

Abbildung 14:	Erforderliche CAMS-Prognosen der Vortage (violett) für die Korrektur der aktuellen CAMS-Prognose über die nächsten 72 h (grün) bei einem Vorlauf des Korrekturverfahrens von 3 Tagen. Der Zeitraum, in dem Messdaten verfügbar sind, ist orange hinterlegt. Die blauen Markierungen geben beispielhaft für die aktuellen Prognosestunden + 12 h, + 24 h, + 60 h und + 72 h an, welche Stundenwerte aus welchen Prognosen der Vortage zur Korrektur herangezogen werden. 58
Abbildung 15:	PM ₁₀ -Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (oben) und Korrelationskoeffizienten (Mitte) an den Stationsorten sowie Soccer Plots (unten) über alle Area-Stationen, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen..... 63
Abbildung 16:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen. 64
Abbildung 17:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosetag, Zeitraum Juli und August 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen. 65
Abbildung 18:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Hit Rate (oben) und der False Alarm Rate (unten) an den Stationsorten über alle Area-Stationen bei einem Schwellenwert von 50 µg/m ³ . 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen..... 66
Abbildung 19:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Scatterplots mit hohen Werten für die Hit Rate in den unkorrigierten (oben) bzw. in den korrigierten CAMS-Prognosen (unten). 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen..... 67
Abbildung 20:	Assessment Target Plots PM ₁₀ Area-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognosetag 69
Abbildung 21:	Forecast Target Plots PM ₁₀ Area-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognosetag 70

Abbildung 22:	Dynamische Evaluierung PM ₁₀ Area-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Oben: Tag – Nacht. Mitte: Sommer – Winter. Unten: Wochentag – Wochenende. 72
Abbildung 23:	PM ₁₀ -Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (oben) und Korrelationskoeffizienten (Mitte) an den Stationsorten sowie Soccer Plots (unten) über alle Spot-Stationen, 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen..... 76
Abbildung 24:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen. 77
Abbildung 25:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosestag, Zeitraum März und April 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen. 78
Abbildung 26:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Hit Rate (oben) und der False Alarm Rate (unten) an den Stationsorten über alle Spot-Stationen bei einem Schwellenwert von 50 µg/m ³ . 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen..... 79
Abbildung 27:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Scatterplots mit hohen Werten für die Hit Rate in den unkorrigierten (oben) bzw. in den korrigierten CAMS-Prognosen (unten). 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen..... 80
Abbildung 28:	Assessment Target Plots PM ₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognosestag 82
Abbildung 29:	Forecast Target Plots PM ₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognosestag 83
Abbildung 30:	Dynamische Evaluierung PM ₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Oben: Tag – Nacht. Mitte: Sommer – Winter. Unten: Wochentag – Wochenende. 85

Abbildung 31:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Hit Rate an den Stationsorten über alle Spot-Stationen. 1. bis 3. Prognosestag, Bezugsjahr 2016. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.	90
Abbildung 32:	Assessment Target Plots PM ₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2016, 1. bis 3. Prognosestag	92
Abbildung 33:	Forecast Target Plots PM ₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2016, 1. bis 3. Prognosestag	93
Abbildung 34:	Dynamische Evaluierung PM ₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2016. Oben: Tag – Nacht. Mitte: Sommer – Winter. Unten: Wochentag – Wochenende.	95
Abbildung 35:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (oben) und Korrelationskoeffizienten (Mitte) an den Stationsorten sowie Soccer Plots (unten) über alle Area-Stationen, 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.....	99
Abbildung 36:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.....	100
Abbildung 37:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosestag, Zeitraum August 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.	101
Abbildung 38:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Hit Rate (oben) und der False Alarm Rate (unten) an den Stationsorten über alle Area-Stationen bei einem Schwellenwert von 40 µg/m ³ . 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.	102
Abbildung 39:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Scatterplots mit hohen Werten für die Hit Rate im Original (oben) bzw. in den korrigierten CAMS-Prognosen (unten). 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.....	104

Abbildung 40:	Assessment Target Plots NO ₂ Area-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognosetag 106
Abbildung 41:	Forecast Target Plots NO ₂ Area-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognosetag 107
Abbildung 42:	Dynamische Evaluierung NO ₂ Area-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben: Tag – Nacht. Mitte: Sommer – Winter. Unten: Wochentag – Wochenende. 109
Abbildung 43:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (oben) und Korrelationskoeffizienten (Mitte) an den Stationsorten sowie Soccer Plots (unten) über alle Verkehrsstationen, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen..... 113
Abbildung 44:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen..... 114
Abbildung 45:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosetag, Zeitraum August 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen. 115
Abbildung 46:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Hit Rate (oben) und der False Alarm Rate (unten) an den Stationsorten über alle Verkehrsstationen bei einem Schwellenwert von 40 µg/m ³ . 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen. 117
Abbildung 47:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Scatterplots mit hohen Werten für die Hit Rate im Original (oben) bzw. in den korrigierten CAMS-Prognosen (unten). 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen..... 119
Abbildung 48:	Assessment Target Plots NO ₂ Verkehrsstationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognosetag 121

Abbildung 49:	Forecast Target Plots NO ₂ Verkehrsstationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognosetag	122
Abbildung 50:	Dynamische Evaluierung NO ₂ Verkehrsstationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben: Tag – Nacht. Mitte: Sommer – Winter. Unten: Wochentag – Wochenende.	124
Abbildung 51:	Dynamische Evaluierung Wochentag – Wochenende an den PM ₁₀ Spot-Stationen für die mit der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur korrigierten CAMS-Prognosen, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Mittelungszeitraum der Wochentagskorrektur: 1 bzw. 2 Wochen (oben); 8 bzw. 12 Wochen (Mitte); 26 bzw. 52 Wochen (unten).	130
Abbildung 52:	Scatterplots der PM ₁₀ -Tagesmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur (n = 26), 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: Station mit der größten Verbesserung des Korrelationskoeffizienten (DEBW118). Rechts: Station mit der größten Verbesserung der Hit Rate (DEST102).....	131
Abbildung 53:	Zeitreihen der PM ₁₀ -Tagesmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, März/April 2019. Links: Station mit der größten Verbesserung des Korrelationskoeffizienten (DEBW118). Rechts: Station mit der größten Verbesserung der Hit Rate (DEST102). Wochenenden im März: 02./03., 09./10., 16./17., 23./24., 30./31. Wochenenden im April: 06./07., 13./14., 20./21., 27./28.	132
Abbildung 54:	Scatterplots der PM ₁₀ -Tagesmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: Station mit der größten Verringerung des Korrelationskoeffizienten (DENW082). Rechts: Station mit der größten Verringerung der Hit Rate (DEHE041).	133
Abbildung 55:	Zeitreihen der PM ₁₀ -Tagesmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, März/April 2019. Links: Station mit der größten Verringerung des Korrelationskoeffizienten (DENW082). Rechts: Station mit der größten Verringerung der Hit Rate (DEHE041). Wochenenden im März: 02./03., 09./10., 16./17., 23./24., 30./31. Wochenenden im April: 06./07., 13./14., 20./21., 27./28.	134

- Abbildung 56: Dynamische Evaluierung Wochentag – Wochenende an den NO₂-Verkehrsstationen für die mit der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur korrigierten CAMS-Prognosen, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Mittelungszeitraum der Wochentags-korrektur: 1 bzw. 2 Wochen (oben); 8 bzw. 12 Wochen (Mitte); 26 bzw. 52 Wochen (unten). 138
- Abbildung 57: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: Station mit der größten Verbesserung des Korrelationskoeffizienten (DEST102). Rechts: Station mit der größten Verbesserung der Hit Rate (DEHB011). 139
- Abbildung 58: Zeitreihen der NO₂-Stundenmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, August 2019. Links: Station mit der größten Verbesserung des Korrelationskoeffizienten (DEST102). Rechts: Station mit der größten Verbesserung der Hit Rate für den Schwellenwert von 40 µg/m³ (DEHB011). Wochenenden im August: 03.08./04.08., 10.08./11.08., 17.08./18.08., 24.08./25.08., 31.08./01.09. 140
- Abbildung 59: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: Station mit der größten Verringerung des Korrelationskoeffizienten und der Hit Rate (DEBY121). Rechts: Station mit dem größten Anstieg der FAR (DEHE040). 141
- Abbildung 60: Zeitreihen der NO₂-Stundenmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, August 2019. Links: Station mit der größten Verringerung des Korrelationskoeffizienten und der Hit Rate (DEBY121). Rechts: Station mit dem größten Anstieg der FAR (DEHE040). Wochenenden im August: 03.08./04.08., 10.08./11.08., 17.08./18.08., 24.08./25.08., 31.08./01.09. ... 142
- Abbildung 61: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEHE037 Wiesbaden-Ringkirche, 1. Prognosetag, Mitte Mai - Juni 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Feiertagskorrektur. Unten links: Wochentagskorrektur. Unten rechts: Wochen- und Feiertagskorrektur kombiniert. 146

Abbildung 62:	Zeitreihen der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEHE037 Wiesbaden-Ringkirche, 1. Prognosetag, Mitte Mai - Juni 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Feiertagskorrektur. Unten links: Wochentagskorrektur. Unten rechts: Wochen- und Feiertagskorrektur kombiniert. Wochenenden im Mai: 18./19., 25./26. Wochenenden im Juni: 01./02., 08./09., 15./16., 22./23., 29./30. Feiertage: Donnerstag, 30.05.; Montag, 10.06.; Donnerstag, 20.06.....	147
Abbildung 63:	Scatterplots der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEHE037 Wiesbaden-Ringkirche, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Feiertagskorrektur. Unten links: Wochentagskorrektur. Unten rechts: Wochen- und Feiertagskorrektur kombiniert.	148
Abbildung 64:	Stündliche Verkehrsganglinie für den Querschnitt der Frankfurter Allee, Berlin, beispielhaft für 3 Wochen im Oktober 2019.....	154
Abbildung 65:	Windrosen Berlin-Tempelhof, 2019. Links: Messdaten. Rechts. MOSMIX-Prognose.	155
Abbildung 66:	Scatterplots der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Oben rechts: Lineares Modell WiGe+WiRi+Std+WoTag. Unten links: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi. Unten rechts: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag.....	158
Abbildung 67:	Scatterplots der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Oben rechts: Lineares Modell WiGe+WiRi+Std+WoTag. Unten links: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi. Unten rechts: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag.....	161
Abbildung 68:	Zeitreihen der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognosetag, Mitte Mai bis Ende Juni 2019. Oben links: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Oben rechts: Lineares Modell WiGe+WiRi+Std+WoTag. Unten links: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi. Unten rechts: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag.....	162

Abbildung 69:	Scatterplots der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagkorrektur. Oben rechts: Lineares Modell WiGe+WiRi+Std+WoTag. Unten links: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag. Unten rechts: Lineares Modell KFZ_CALC+WiGe+WiRi+Std+WoTag. 167
Abbildung 70:	Scatterplots der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben: WiGe+WiRi aus Beobachtungen. Unten: WiGe+WiRi aus MOSMIX. Links: Lineares Modell WiGe+WiRi+Std+WoTag. Rechts: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag..... 170
Abbildung 71:	Zeitreihen der NO ₂ -Stundenmittelwerte für den LM-Delta-Ansatz auf Basis des Linearen Modells KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognosetag, Mitte Mai bis Ende Juni 2019. Links: WiGe+WiRi aus Beobachtungen. Rechts: WiGe+WiRi aus MOSMIX..... 171
Abbildung 72:	Scatterplots der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEBE063 Berlin Silbersteinstraße, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Mitte links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Mitte rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+ WoTag, Meteo aus Messung. Unten links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. Unten rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX.. 174
Abbildung 73:	Windrosen Mannheim, 2019. Links: Messdaten. Rechts. MOSMIX-Prognose. 175
Abbildung 74:	Scatterplots der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEBW098 Mannheim Friedrichsring, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Mitte links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Mitte rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+ WoTag, Meteo aus Messung. Unten links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. Unten rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX..... 179
Abbildung 75:	Windrosen Stuttgart Echterdingen, 2019. Links: Messdaten. Rechts. MOSMIX-Prognose..... 180

Abbildung 76:	Scatterplots der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEBW116 Stuttgart Hohenheimer Str., 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Mitte links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Mitte rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+ WoTag, Meteo aus Messung. Unten links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. Unten rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX.....	184
Abbildung 77:	Windrosen Heilbronn, 2019. Links: Messdaten, Station Heilbronn/Neckar. Rechts. MOSMIX-Prognose, Interpolationspunkt Heilbronn.	185
Abbildung 78:	Scatterplots der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEBW152 Heilbronn Weinsberger Str., 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Mitte links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Mitte rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+ WoTag, Meteo aus Messung. Unten links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. Unten rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. .	189
Abbildung 79:	Windrosen Würzburg, 2019. Links: Messdaten. Rechts. MOSMIX-Prognose.	190
Abbildung 80:	Scatterplots der NO ₂ -Stundenmittelwerte, DEBY119 Würzburg Stadtring Süd, 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Mitte links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Mitte rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+ WoTag, Meteo aus Messung. Unten links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. Unten rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. .	194

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Anzahl der betrachteten Messstationen nach Schadstoff und Stationstyp	28
Tabelle 2:	Einfluss der Behandlung negativer korrigierter Modellwerte: Vergleich der statistischen Kennwerte für NO ₂ , jeweils Median über alle verkehrsnahen Stationen.	31
Tabelle 3:	Bestimmtheitsmaß für verschiedene Lineare Modelle zur Prognose der NO ₂ -Konzentration in Abhängigkeit der betrachteten Eingangsgrößen (DEHE065, 2019).....	43

Tabelle 4:	Bestimmtheitsmaß für verschiedene Lineare Modelle zur Prognose der Differenzen zwischen den CAMS-Prognosen für NO ₂ am Stationsort und den NO ₂ -Konzentrationen in Abhängigkeit der betrachteten Eingangsgrößen 45
Tabelle 5:	Verwendete statistische Kennwerte / Metriken..... 47
Tabelle 6:	PM ₁₀ -Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Area-Stationen, 2019..... 60
Tabelle 7:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Area-Stationen, 2019..... 61
Tabelle 8:	PM ₁₀ -Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Spot-Stationen, 2019..... 74
Tabelle 9:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Spot-Stationen, 2019..... 75
Tabelle 10:	PM ₁₀ -Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Spot-Stationen, 2016..... 87
Tabelle 11:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Spot-Stationen, 2016..... 88
Tabelle 12:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Area-Stationen, 2019..... 97

Tabelle 13:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle verkehrsnahen Stationen, 2019 111
Tabelle 14:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: Statistische Kennwerte für die mit der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS HV), Wochentagskorrektur mit einem Mittelungszeitraum über 1, 2, 8, 12, 26 und 52 Wochen (WD1, ..., WD52), jeweils 1. Prognosetag, Median über alle Spot-Stationen, 2019 128
Tabelle 15:	PM ₁₀ -Tagesmittelwerte: MQI_HD, MQI_YR und MQI_Forecast für die Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentagskorrektur, Wochentagskorrekturfaktor als Mittelwert über 1, 2, 3, 4, 6, 8, 12, 26 und 52 Wochen 129
Tabelle 16:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die mit der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS HV), Wochentags-korrektur mit einem Mittelungszeitraum über 1, 2, 8, 12, 26 und 52 Wochen (WD1, ..., WD52), jeweils 1. Prognosetag, Median über alle Verkehrsstationen, 2019 136
Tabelle 17:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: MQI_HD, MQI_YR und MQI_Forecast für die Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentagskorrektur, Wochentagskorrekturfaktor als Mittelwert über 1, 2, 3, 4, 6, 8, 12, 26 und 52 Wochen 137
Tabelle 18:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die reine Hybrid-Vorhersage (CAMS HV) sowie mit Feiertagskorrektur mit einem Mittelungszeitraum über 1, 2, 12 und 26 Wochen (HD1, ..., HD26), jeweils 1. Prognosetag, Median über alle Verkehrsstationen, 2019 145
Tabelle 19:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die reine Hybrid-Vorhersage (CAMS HV), die Hybrid-Vorhersage mit Feiertags- bzw. Wochentagskorrektur (CAMS HV HD26 bzw. WD26) und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (CAMS HV WDHD26), jeweils 1. Prognosetag, Median über alle verkehrsnahen Stationen, 2019 150
Tabelle 20:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur (CAMS HV WD26) und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (CAMS HV WDHD26), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle verkehrsnahen Stationen, 2019 151

Tabelle 21:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: MQI_HD für die reine Hybrid-Vorhersage (CAMS HV), die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur (CAMS HV WD26) und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (CAMS HV WDHD26), 1. bis 3. Prognosetag.....	152
Tabelle 22:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: MQI_YR für die reine Hybrid-Vorhersage (CAMS HV), die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur (CAMS HV WD26) und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (CAMS HV WDHD26), 1. bis 3. Prognosetag.....	152
Tabelle 23:	NO ₂ -Stundenmittelwerte: MQI_Forecast für die reine Hybrid-Vorhersage (CAMS HV), die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur (CAMS HV WD26) und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (CAMS HV WDHD26), 1. bis 3. Prognosetag.....	153
Tabelle 24:	Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie verschiedene Lineare Modelle zur Prognose der NO ₂ -Konzentration: Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee. Bezugsjahr 2019, 1. Prognosetag...	157
Tabelle 25:	Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO ₂ -Konzentration: Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee. Bezugsjahr 2019, 1. Prognosetag.....	160
Tabelle 26:	Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie verschiedene LM-Delta-Ansätze auf Basis kombinierter Linearer Modelle: Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee	164
Tabelle 27:	Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO ₂ -Konzentration unter Verwendung einer typisierten Verkehrsganglinie (KFZ_CALC): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee	166
Tabelle 28:	Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO ₂ -Konzentration unter Verwendung prognostizierter meteorologischer Daten (MOSMIX): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee.....	169

Tabelle 29:	Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie zwei verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO ₂ -Konzentration unter Verwendung gemessener („Meteo aus Messung“) bzw. prognostizierter meteorologischer Daten („Meteo aus MOSMIX“): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE063 Berlin Silbersteinstraße..... 172
Tabelle 30:	Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie zwei verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO ₂ -Konzentration unter Verwendung gemessener („Meteo aus Messung“) bzw. prognostizierter meteorologischer Daten („Meteo aus MOSMIX“): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBW098 Mannheim Friedrichsring 177
Tabelle 31:	Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie zwei verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO ₂ -Konzentration unter Verwendung gemessener („Meteo aus Messung“) bzw. prognostizierter meteorologischer Daten („Meteo aus MOSMIX“): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBW116 Stuttgart Hohenheimer Straße 182
Tabelle 32:	Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie zwei verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO ₂ -Konzentration unter Verwendung gemessener („Meteo aus Messung“) bzw. prognostizierter meteorologischer Daten („Meteo aus MOSMIX“): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBW152 Heilbronn Weinsberger Straße Ost..... 187
Tabelle 33:	Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie zwei verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO ₂ -Konzentration unter Verwendung gemessener („Meteo aus Messung“) bzw. prognostizierter meteorologischer Daten („Meteo aus MOSMIX“): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBY119 Würzburg Stadtring Süd..... 192

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Erläuterung
1TMAX	Maximaler Ein-Stunden-Mittelwert eines Tages
1TMW	Tagesmittelwert
8TMAX	Maximaler gleitender Acht-Stunden-Mittelwert eines Tages
BGBI	Bundesgesetzblatt
BMUV	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz
CAMS	Copernicus Atmosphere Monitoring Service
CTM	Chemie-Transport-Modell
DWD	Deutscher Wetterdienst
FA	fälschlicherweise vorhergesagte Schwellenwertüberschreitungen / False Alarms
FAIRMODE	Forum for air quality modelling in Europe
FAR	False Alarm Rate
FGE	Fractional Gross Error
FKZ	Forschungskennzahl
HD	Feiertagskorrektur
HV	Hybrid-Vorhersage
Kfz	Kraftfahrzeug
LQI	Luftqualitätsindex
MA	nicht erfasste Schwellenwertüberschreitungen / Missed Alarms
MeasExc	Anzahl der gemessenen Überschreitungen
MEZ	Mitteleuropäische Zeit
MFB	Mean Fractional Bias
MOS	Model Output Statistics
MQI	Modellierungsqualitäts-Indikator / Modelling Quality Indicator
MQO	Modellierungsqualitäts-Ziel / Modelling Quality Objective
R	Korrelationskoeffizient
RSME	mittlerer quadratischer Fehler / Root Mean Square Error
SD	Standardabweichung / Standard Deviation
SMW	Stundenmittelwert
Std	Stunde
UBA	Umweltbundesamt
UTC	koordinierte Weltzeit / Coordinated Universal Time
WiGe	Windgeschwindigkeit
WiRi	Windrichtung
WoTag	Wochentag

1 Einführung

Das Umweltbundesamt (UBA) stellt seit Ende der 1990er Jahre u. a. Karten bundesweiter Ozonprognosen zur Information der Öffentlichkeit bereit. Die Veröffentlichung der Karten erfolgt derzeit sowohl über die Webpräsenz des UBA als auch über die App „Luftqualität“.

Die aktuellen Ozonprognosen basieren auf Prognosen aus dem CAMS-Ensemble. Diese Prognosen werden täglich vom Copernicus Atmosphärendienst (Copernicus Atmosphere Monitoring Service, CAMS) in stündlicher Auflösung für den aktuellen Tag und die drei folgenden Tage bereitgestellt. Die Ensemble-Daten beruhen auf den Ergebnissen von mittlerweile 11 Chemie-Transport-Modellen (CTM), deren Output zum Teil durch die Assimilation von Satellitendaten optimiert wird (CAMS, 2021; CAMS, 2022).

Die CAMS-Modellierung liefert flächenbezogene Konzentrationswerte für eine horizontale Auflösung von ca. $7 \times 11 \text{ km}^2$. Sie erfasst damit nur den regionalen Hintergrund. In der Folge liegen die Prognosen auf Stationsebene im Mittel häufig zu niedrig, oder die gemessenen Maximalwerte werden nicht korrekt prognostiziert. Dies hat negative Auswirkungen auf die korrekte Vorhersage insbesondere von Schwellenwertüberschreitungen sowohl bei sehr hohen Luftschadstoffkonzentration, die die Information oder ggf. Warnung der Bevölkerung entsprechend der Luftqualitätsrichtlinie 2008/50/EG (EU, 2008) erforderlich machen, als auch bei der Bestimmung eines Luftqualitätsindex (LQI).

Im Rahmen des Refoplan-Vorhabens „Sicherstellung der Ozonprognose“ (IVU Umwelt, 2018) wurde untersucht, inwieweit sich die Vorhersagegüte der CAMS-Ozonprognosen für Deutschland insbesondere hinsichtlich der Erfassung von Schwellenwertüberschreitungen durch eine nachgeschaltete Bearbeitung verbessern lässt. Eine entsprechende Untersuchung wurde auch für die CAMS-PM₁₀-Prognosen durchgeführt.

Zur Identifikation geeigneter Verfahren für die Korrektur der CAMS-Prognosen an den Messorten wurde in IVU Umwelt (2018) eine Testumgebung implementiert, mit der die Ergebnisse der reinen CAMS-Prognosen an den Stationsorten und die Ergebnisse verschiedener Korrekturverfahren auf der Basis statistischer Kennwerte evaluiert wurden. Dabei wurden ausschließlich Stationen betrachtet, die gemäß der Stationsklassifikation des UBA (Spot/Area) als „Area-Stationen“, d. h. größtenteils ländliche und städtische Hintergrundstationen, definiert sind.

Die Erkenntnisse aus der Evaluierung wurden in der Folge in einem Tool („Online-Tool Ozonprognose“) für die Korrektur der CAMS-Prognosen im operationellen Betrieb am UBA umgesetzt. Die Korrektur erfolgt dabei in zwei Schritten. Im ersten Schritt werden die CAMS-Prognosen mit dem gewählten Korrekturverfahren an den Messorten korrigiert. Im zweiten Schritt werden die an den Messorten ermittelten Korrekturwerte in die Fläche interpoliert und anschließend auf das Gitter der CAMS-Modellprognosen angewendet.

Das Online-Tool wird bisher nur für Prognosen der Luftschadstoffe Ozon und Feinstaub PM₁₀ (ohne verkehrsnah Standorte) eingesetzt. Im Rahmen des hier beschriebenen Projektes wurde das Online-Tool dahingehend erweitert, dass Prognosen auch für den Luftschadstoff NO₂ erstellt und entsprechende Kartendarstellungen und Datengrundlagen zur Information der Öffentlichkeit erzeugt werden können. Zudem kann das Online-Tool nun auch für Prognosen an Spot- bzw. Verkehrsstationen angewendet werden. Dazu wurde die Testumgebung entsprechend erweitert und weitere Korrekturverfahren entwickelt und getestet.¹

¹ Die Erweiterung um den Luftschadstoff PM_{2,5} erfolgte dann für das Online-Tool und die Testumgebung im Rahmen des UBA-Projekts „Evaluation und Vergleich verschiedener Vorhersagesysteme für die Luftqualität“.

Anmerkung

Im Text wird der Punkt als Dezimaltrennzeichen verwendet.

2 Vorgehensweise

Für die Bearbeitung der in Abschnitt 1 beschriebenen Aufgabenstellung wurde im ersten Schritt die in IVU Umwelt (2018) als Korrekturverfahren empfohlene und seitdem im Online-Tool für die Ozonprognose standardmäßig angewendete Hybrid-Vorhersage hinsichtlich ihrer Eignung für die Korrektur der CAMS-Prognosen für NO₂ und PM₁₀ untersucht. Dabei wurden im Unterschied zu IVU Umwelt (2018) nicht nur die Stationen betrachtet, die nach der UBA-Stationsklassifikation als „Area“-Stationen definiert sind, sondern auch die Stationen, die als „Spot“- bzw. verkehrsnah Stationen definiert sind (Abschnitt 7).

Die Untersuchungen wurden für die Stationstypen „Area“ und „Spot“ bzw. „verkehrsnah“ getrennt durchgeführt. Konzentrationen an verkehrsbezogenen Hotspots werden durch den Emissionsbeitrag des lokalen Verkehrs beeinflusst. Dieser Beitrag kann je Hotspot sehr unterschiedlich sein und ist bei NO₂ im Allgemeinen deutlich höher als bei PM₁₀. Der lokale Verkehrsbeitrag ist zudem je Hotspot über den Tagesverlauf sehr variabel, je nachdem wie der zeitliche Verlauf des Verkehrsgeschehens ist. Es wurde daher erwartet, dass sich für Spot- bzw. verkehrsnah Stationsorte spezifische Korrekturverfahren für die CAMS-Prognosen entwickeln lassen, die den verkehrlichen Einfluss auf den Konzentrationsverlauf lokal erfassen und berücksichtigen und so zu einer gegenüber der Hybrid-Vorhersage verbesserten Korrektur führen. Im zweiten Schritt wurden daher der Wochengang, Ferien- und Feiertage sowie verkehrliche Tagesgänge (Verkehrsganglinien) als mögliche Einflussfaktoren des Verkehrs auf den Konzentrationsverlauf untersucht. Es zeigte sich, dass sowohl der Wochengang (Abschnitt 8) als auch einzelne Feiertage (Abschnitt 9) als Erweiterung der Hybrid-Vorhersage erfolgreich bei der Korrektur der CAMS-Prognosen berücksichtigt werden können. Für die Berücksichtigung verkehrlicher Tagesgänge wurde beispielhaft ein Korrekturverfahren entwickelt, das auf einer linearen Regression beruht (Abschnitt 10).

Die Evaluierung der Hybrid-Vorhersage und ihrer Erweiterungen sowie als Vergleichsgrundlage der reinen CAMS-Prognosen an den Stationsorten wurde im Wesentlichen mit der in IVU Umwelt (2018) entwickelten Testumgebung (Abschnitt 6) durchgeführt. Die Testumgebung wurde dafür im Rahmen dieses Projekts um folgende Punkte erweitert:

- ▶ Berücksichtigung von NO₂, insbesondere auch, was die Evaluierung von Schwellenwertüberschreitungen betrifft,
- ▶ Differenzierung der Evaluierung nach Stationstypen, zum einen nach der Stationsklassifizierung des UBA (Spot/Area) und zum anderen nach EoI (EG, 1997),
- ▶ verkehrsspezifische Erweiterungen der Hybrid-Vorhersage, d. h. Berücksichtigung von Wochengang und einzelnen Feiertagen.

Die in der Testumgebung implementierte Hybrid-Vorhersage sowie ihre beiden Erweiterungen bezüglich der Wochentags- und der Feiertagskorrektur werden in Abschnitt 4 beschrieben. Für die Evaluierung wird von der Testumgebung ein umfangreicher Satz statistischer Kennwerte berechnet (Abschnitt 5.1) und sowohl in tabellarischer als auch in grafischer Form ausgegeben. Zur Ergänzung wurde das im Rahmen der FAIRMODE-Initiative entstandene DELTA-Tool für "Assessment & Planning" in der Version 6.0.1 (Thunis & Cuvelier, 2020; Janssen & Thunis, 2020), das in Abschnitt 5.2 beschrieben wird, auf die originalen und die korrigierten CAMS-Prognosen angewendet.

Die Korrekturansätze, die im Rahmen des Projekts auf Basis einer linearen Regression entwickelt wurden und u. a. verkehrsspezifische Tagesganglinien berücksichtigen, werden in Abschnitt 4.4 vorgestellt. Diese Korrekturansätze wurden exemplarisch für eine Handvoll

Stationen untersucht und sind nicht in der Testumgebung implementiert. Die Evaluierung der damit produzierten Prognosen wurde aber mit dem gleichen Satz statistischer Kennwerte gemäß Abschnitt 5.1 durchgeführt, den auch die Testumgebung verwendet, so dass stationsweise ein Vergleich der statistischen Kennwerte zwischen den verschiedenen Korrekturverfahren möglich war (Abschnitt 10).

Nach abgeschlossener Evaluierung wurden die Wochentags- und die Feiertagskorrektur sowie die Möglichkeiten zur Differenzierung des Korrekturverfahrens in Abhängigkeit von der Stationsklassifizierung des UBA nach „Spot“ und „Area“ in das operationelle Online-Tool implementiert. Der zweite Schritt der in Abschnitt 1 beschriebenen Nachbearbeitung der CAMS-Prognosen in der operationellen Anwendung, die Interpolation der an den Messorten ermittelten Korrekturwerte in die Fläche und die anschließende Anwendung der interpolierten Korrekturwerte auf das Gitter der Modellprognosen, war nicht Gegenstand der aktuellen Untersuchungen und wurde gegenüber IVU Umwelt (2018) nicht verändert. Die Interpolation der Korrekturwerte in die Fläche beruht dabei ausschließlich auf den Korrekturwerten, die für die als „Area“ klassifizierten Stationen berechnet werden. Korrekturwerte an Spot-Stationen fließen nicht in die Interpolation und flächenhafte Korrektur der CAMS-Prognosen ein.

3 Eingangsdaten

3.1 Messdaten

Vom UBA wurden Messzeitreihen für NO₂ und PM₁₀ als Stundenmittelwerte in MEZ (ohne Berücksichtigung der Sommerzeit) bereitgestellt. Der angegebene Zeitstempel bezieht sich dabei jeweils auf das Ende des Mittelungszeitraums. Die Messdaten wurden vom UBA bereits als validierte, endgültige Daten übergeben, sie enthalten Werte bis zur negativen Nachweisgrenze.

Bezugsjahr der Evaluierungen im vorliegenden Projekt und damit auch der Messzeitreihen war das Jahr 2019. Für PM₁₀ wurde zudem in Ergänzung zu ersten Untersuchungen für Area-Stationen für das Bezugsjahr 2016 in IVU Umwelt (2018) in diesem Projekt PM₁₀ an Spot-Stationen im Bezugsjahr 2016 betrachtet.

Passend zu den Messzeitreihen wurden vom UBA die Metadaten der Messstationen für 2016 und 2019 für die betrachteten Luftschadstoffe zur Verfügung gestellt. Die Metadaten enthalten für jede darin aufgeführte Station den Stationscode, die Standortkoordinaten und die geografische Höhe der Station sowie die Zuordnung zur UBA-Stationsklassifizierung nach „Spot“ und „Area“. Die Zuordnung der einzelnen Stationen zu der Stationsklassifizierung nach EoI (type of station, type of area) lag aus Angaben in den Messzeitreihen selbst vor. Tabelle 1 zeigt die Anzahl der für die Evaluierung verwendeten Messstationen, unterteilt nach Schadstoff und Stationstyp.

Tabelle 1: Anzahl der betrachteten Messstationen nach Schadstoff und Stationstyp

Daten	Area-Messstationen	Spot-Messstationen
PM ₁₀ 2016	(betrachtet in IVU Umwelt (2018))	117
PM ₁₀ 2019	233	125
NO ₂ 2019	256	150

3.2 Modelldaten

Für das Bezugsjahr 2019 wurden die CAMS-Prognosen für die Schadstoffe NO₂ und PM₁₀ vom UBA bereitgestellt. Die PM₁₀-CAMS-Prognosen für 2016 wurden aus IVU Umwelt (2018) übernommen.

Die CAMS-Prognosen lagen als gitterbezogene Daten im NetCDF-Format vor. Starttermin der Prognosen war täglich 00:00 Uhr UTC, geliefert wurde jeweils der Starttermin und die Prognosen für die nächsten 72 Stunden in stündlicher Auflösung. Im Gegensatz zu den Messdaten, die als Stundenmittelwerte vorlagen (Abschnitt 3.1), stellen die CAMS-Prognosen zu jeder Stunde Momentanwerte dar. Bezugszeitzone ist UTC.

4 Korrekturverfahren

4.1 Hybrid-Vorhersage

Die im Online-Tool für die Ozonprognose standardmäßig angewendete Hybrid-Vorhersage, die im Rahmen des vorliegenden Projekts hinsichtlich ihrer Eignung für die Korrektur der CAMS-Prognosen für NO₂ und PM₁₀ untersucht wurde und die die Grundlage für die Erweiterungen spezifisch für verkehrsnahen Stationen in Abschnitt 4.2 und Abschnitt 4.3 ist, wurde gegenüber IVU Umwelt (2018) nicht verändert. Ihre Beschreibung wurde daher im Wesentlichen aus IVU Umwelt (2018) übernommen und wird hier im Folgenden nochmals aufgeführt.

Die Hybrid-Vorhersage ist ein einfaches Verfahren zur Korrektur von Luftschadstoffvorhersagen, die mit Hilfe von Chemie-Transport-Modell-Rechnungen (CTM) erzeugt wurden. Dabei wird ein für einen Messort für den zukünftigen Zeitpunkt $t+\Delta t$ prognostizierter Modellwert C_{mod} mit dem Mittelwert der Differenzen zwischen Messwert C_{obs} und Modellwert C_{mod} an diesem Ort zu $nVorlauf$ früheren Zeitpunkten korrigiert:

$$C_{mod,t+\Delta t}^{korr} = C_{mod,t+\Delta t} + \frac{1}{nVorlauf} \sum_{k=1}^{nVorlauf} (C_{obs,k} - C_{mod,k}) \quad (1)$$

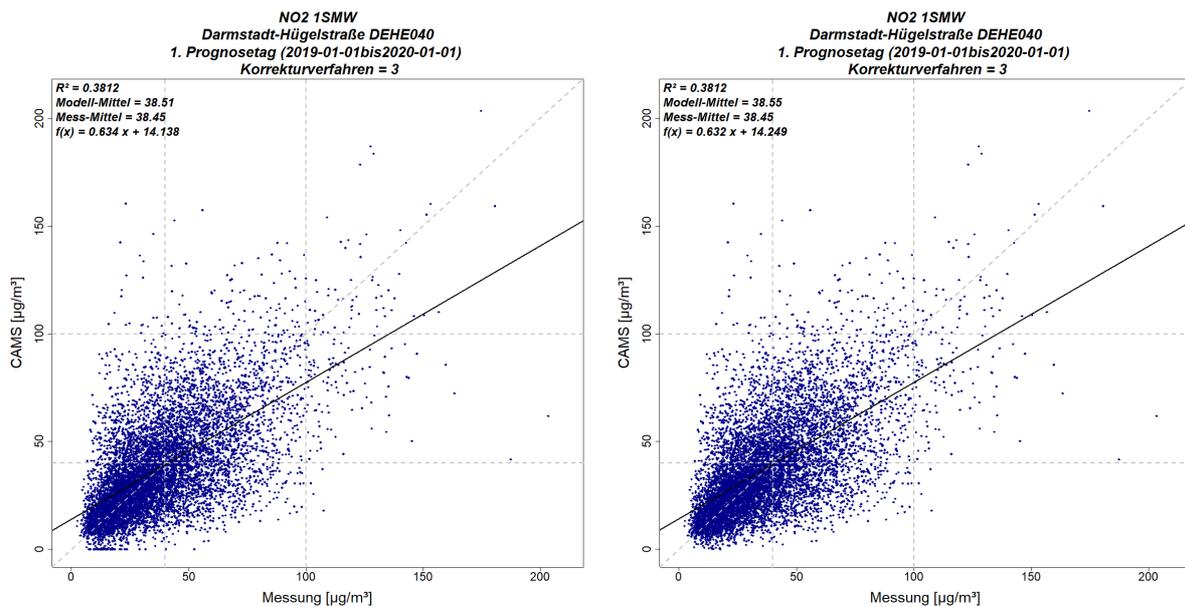
Δt beträgt dabei 24 h. Kang et al. (2008) setzen $nVorlauf$ auf einen Tag, mithin wird der prognostizierte Modellwert immer mit der Differenz zwischen Mess- und Modellwert vom Vortag zur selben Stunde korrigiert. McKeen et al. (2005) hingegen betrachten eine 56-tägige Episode und verwenden für $nVorlauf$ alle an der jeweiligen Station vorliegenden Tage mit Messwerten. Das Verfahren wird dort als „mean subtraction“ oder „subtraction of mean bias“ bezeichnet. Neal et al. (2014) setzen $nVorlauf$ wie Kang et al. (2008) auf einen Tag. Zur Verringerung des Einflusses von Messfehlern auf den Korrekturterm setzen Neal et al. (2014) den Korrekturterm zu 50 % aus der Differenz zwischen Mess- und Modellwert vom Vortag am Stationsort und zu 50 % aus dem Median der Differenzen zwischen Mess- und Modellwert vom Vortag an allen anderen Stationen gleichen Typs (städtisch, vorstädtisch, ländlich) zusammen. Zudem lassen Neal et al. (2014) den Korrekturterm linear über die Vorhersagelänge (bei Neal et al. (2014) 5 Tage) gegen den 30-Tage-Mittelwert der Korrekturterme für die jeweilige Station und Stunde konvergieren.

Im hier beschriebenen Projekt wurde die Hybrid-Vorhersage analog zu IVU Umwelt (2018) entsprechend Gleichung (1) implementiert. Testläufe in IVU Umwelt (2018) für $nVorlauf = 3$ und $nVorlauf = 1$ haben gezeigt, dass ein Vorlauf von 3 Tagen für die Stundenmittelwerte zu einer geringfügig höheren Korrelation sowie für die maximalen Ein-Stunden-Mittelwerte eines Tages und die maximalen gleitenden Acht-Stunden-Mittelwerte eines Tages zu einem etwas geringeren Mean Fractional Bias führt als ein Vorlauf von nur einem Tag. Allerdings werden die Maxima sowie die Standardabweichung bei $nVorlauf = 3$ deutlich gedämpft, und der zeitliche Versatz, mit dem gemessene Spitzenkonzentrationen in die Korrektur eingespeist werden, ist für $nVorlauf = 3$ größer als für $nVorlauf = 1$. Aus diesem Grund, und weil mit den korrigierten Modellwerten insbesondere auch Schwellenwertüberschreitungen besser erfasst werden sollen, wurde in IVU Umwelt (2018) für das Hybrid-Verfahren $nVorlauf = 1$ empfohlen und als Standardwert im operationellen Online-Tool Ozonprognose umgesetzt. Im vorliegenden Projekt wird weiterhin $nVorlauf = 1$ verwendet.

Die Hybrid-Vorhersage kann auch bei ausschließlich positiven Mess- und Modellwerten zu negativen korrigierten Modellwerten führen. Um dies zu vermeiden, wurde in IVU Umwelt (2018) für die korrigierten Modellwerte eine untere Schranke von 0 µg/m³ angesetzt. Dies führt je nach Station bzw. Messzeitreihe zu einer Häufung von korrigierten Modellwerten mit Wert 0 µg/m³ in den Scatterplots (siehe beispielhaft in Abbildung 1, links). Im Verlauf des

vorliegenden Projekts wurde daher entschieden, korrigierte Modellwerte $< 0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auf den Wert der unkorrigierten CAMS-Prognose zu setzen. Ein Vergleich der gemäß Abschnitt 5.1 berechneten statistischen Kennwerte für die beiden Vorgehensweisen zeigt, dass die Verwendung der unkorrigierten CAMS-Prognosen statt der unteren Schranke von $0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ für negative korrigierte Modellwerte keinen relevanten Einfluss hat (siehe beispielhaft für NO_2 Tabelle 2). Im Beispiel erfahren der Mean Fractional Bias (MFB) und der Fractional Gross Error (FGE) im Median eine minimale Verbesserung. Der Modell-Mittelwert (Mean Mod) steigt minimal an. Hit Rate und False Alarm Rate (FAR) ändern sich nicht, weil die „Ersatzwerte“ aus den unkorrigierten CAMS-Prognosen den Messwert in der Regel unterschätzen und nicht in die Nähe der betrachteten Schwellenwerte kommen. Die Häufung der korrigierten Modellwerte mit Wert $0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ in den Scatterplots entfällt (Abbildung 1, rechts).

Abbildung 1: Beispiel für die Behandlung negativer korrigierter Modellwerte: Scatterplots für mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen für NO_2 . Links: Untere Schranke von $0 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Rechts: Verwendung unkorrigierter CAMS-Prognosen.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Tabelle 2: Einfluss der Behandlung negativer korrigierter Modellwerte: Vergleich der statistischen Kennwerte für NO₂, jeweils Median über alle verkehrsnahen Stationen.

Metrik	negative Werte ersetzt durch 0 µg/m ³	negative Werte ersetzt durch unkorrigierte CAMS-Prognosen
Min Obs [µg/m ³]	2.00	2.00
Min Mod [µg/m ³]	0.00	0.14
Mean Obs [µg/m ³]	34.25	34.25
Mean Mod [µg/m ³]	34.25	34.30
Max Obs [µg/m ³]	133.08	133.08
Max Mod [µg/m ³]	132.86	132.86
SD Obs [µg/m ³]	17.93	17.93
SD Mod [µg/m ³]	18.29	18.25
Korrelation [-]	0.55	0.55
RMSE [µg/m ³]	17.11	17.10
BIAS [µg/m ³]	-0.01	0.01
MFB [%]	-0.69	-0.38
FGE [%]	40.34	39.98
MeasExc (40 µg/m ³) ¹ [-]	2786	2786
Hit Rate (40 µg/m ³) ¹ [%]	59.86	59.86
FAR (40 µg/m ³) ¹ [%]	20.57	20.57
MeasExc (100 µg/m ³) ² [-]	23	23
Hit Rate (100 µg/m ³) ² [%]	17.98	17.98
FAR (100 µg/m ³) ² [%]	0.26	0.26

¹: Schwellenwert 40 µg/m³ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert 100 µg/m³ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

Da der Einfluss der geänderten Behandlung negativer korrigierter Modellwerte auf die statistischen Kennwerte gering ist, wurde darauf verzichtet, die bis dahin durchgeführten Untersuchungen zu wiederholen. Dementsprechend wurden bei der Berechnung der statistischen Kennwerte für die reine Hybrid-Vorhersage (Abschnitt 7) und für die Wochentagskorrektur (Abschnitt 8) negative korrigierte Modellwerte durch die untere Schranke von 0 µg/m³ ersetzt, während sie für die Feiertagskorrektur (Abschnitt 9) durch die Werte der unkorrigierten CAMS-Prognosen ersetzt wurden.

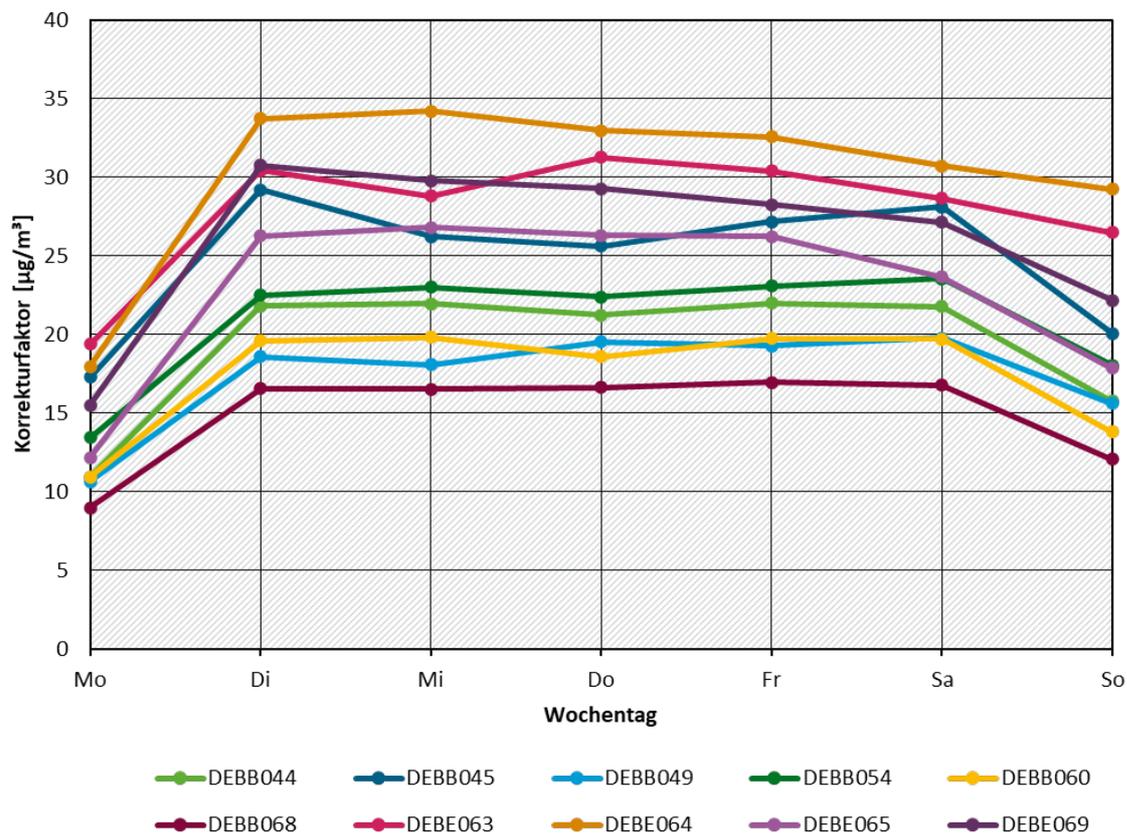
4.2 Wochentagskorrektur

Die Korrekturwerte der Hybrid-Vorhersage, die sich aus dem zweiten Term der rechten Seite von Gleichung (1) ergeben, zeigen für NO₂ an Standorten verkehrsnaher Messstationen im Mittel häufig eine starke Wochentagsabhängigkeit, wenn gemäß Abschnitt 4.1 $n_{Vorlauf} = 1$ Tag gesetzt wird. In Abbildung 2 ist dies beispielhaft für einige verkehrsnaher Messstandorte in Brandenburg

und Berlin dargestellt. Es zeigt sich, dass an Sonntagen und vor allem an Montagen im Mittel deutlich niedrigere Korrekturwerte berechnet werden als an anderen Wochentagen.

Bei $n_{Vorlauf} = 1$ Tag wird der Korrekturwert der Hybrid-Vorhersage für heute für eine bestimmte Uhrzeit aus der Differenz zwischen Mess- und Modellwert von gestern zur selben Uhrzeit bestimmt, d. h. Korrekturwerte für Montag enthalten die Differenz zwischen Mess- und Modellwert und damit den Fehler von Sonntag, Korrekturwerte für Dienstag enthalten den Fehler von Montag etc. Betrachtet man vor diesem Hintergrund den mittleren Wochengang der Korrekturwerte in Abbildung 2, so folgt daraus, dass im Regelfall an verkehrsnahen Messstationen die Modellwerte an Samstagen zu stark korrigiert werden, nämlich mit dem größeren Fehler von Freitag, und dass sie an Montagen zu wenig korrigiert werden, nämlich mit dem kleineren Fehler von Sonntag.

Abbildung 2: Wochentagsgemittelte Korrekturwerte der Hybrid-Vorhersage für die stündlichen NO₂-Zeitreihen der CAMS-Prognose, 2019, am Beispiel einiger verkehrsnaher Messstandorte



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Daraus lässt sich eine Korrektur für die Korrekturwerte der Hybrid-Vorhersage ableiten, die im Weiteren als „Wochentagskorrektur“ bezeichnet wird. Für einen Montag i wird der mit der Hybrid-Vorhersage bestimmte Korrekturwert $KF_{Mo,i}$ (der den Fehler von Sonntag enthält) neu berechnet, indem ein Wochentagskorrekturfaktor $WD_{Mo,i}$ addiert wird:

$$KF_{Mo,i,WD} = KF_{Mo,i} + WD_{Mo,i} \quad (2)$$

Der Wochentagskorrekturfaktor $WD_{Mo,i}$ wird dazu berechnet als Mittelwert der Differenzen der Korrekturwerte von Dienstag (die den Fehler von Montag enthalten) und Montag (die den Fehler von Sonntag enthalten) über n zurückliegende Wochen:

$$WD_{Mo,i} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (KF_{Di,i-j} - KF_{Mo,i-j}) \quad (3)$$

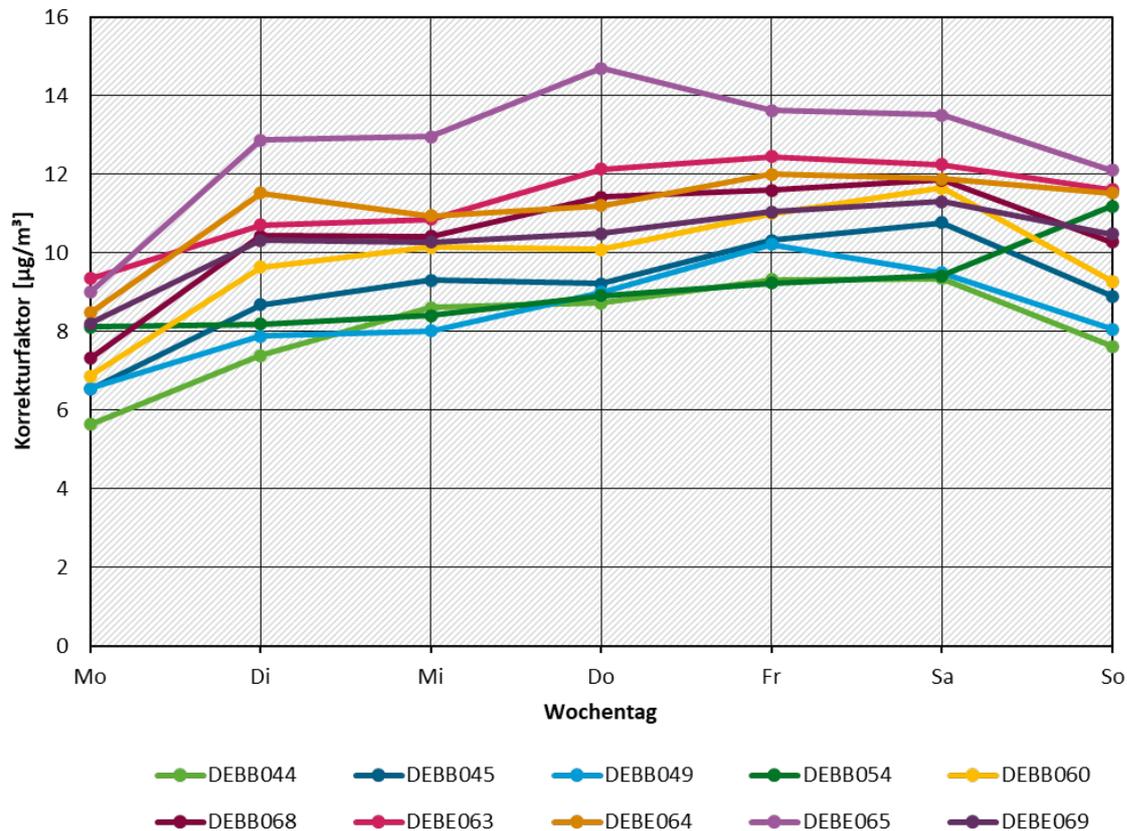
Die Korrektur der Korrekturfaktoren erfolgt dabei stundengenau, d. h. $WD_{Mo,i}$ für einen Montag i , 11:00 Uhr, wird berechnet aus den Korrekturfaktoren für 11:00 Uhr der Dienstage und Montage der vergangenen n Wochen. Für die anderen Wochentage wird analog vorgegangen.

Testläufe mit statistischer Auswertung gemäß Abschnitt 5.1 für $n = 1, 2, 3, 4, 6, 8, 12, 26$ und 52 Wochen haben gezeigt, dass ein Mittelungszeitraum über mindestens $n = 12$, besser $n = 26$ Wochen zur Bestimmung von WD gewählt werden sollte (siehe Abschnitt 8). Der volle Mittelungszeitraum steht dabei erst ab der $n+1$ -sten Woche, für die eine Prognose durchgeführt wird, zur Verfügung, davor wird der jeweils maximal mögliche Mittelungszeitraum verwendet.

Mit $n = 26$ Wochen ergab sich durch die Wochentagskorrektur gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage an einzelnen verkehrsnahen Stationsorten eine Verbesserung z. B. des Korrelationskoeffizienten und der Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ um bis zu 10 bzw. 9 Prozentpunkte (vgl. Abschnitt 8). An einigen wenigen Stationsorten kam es zu Verschlechterungen des Korrelationskoeffizienten und der genannten Hit Rate durch die Wochentagskorrektur um bis zu einem Prozentpunkt bzw. 0.1 Prozentpunkte. Die Verwendung der Wochentagskorrektur im Zusammenhang mit der Hybrid-Vorhersage mit $n_{\text{Vorlauf}} = 1$ Tag wird daher für verkehrsnahen NO_2 -Messstationen grundsätzlich empfohlen. Als Mittelungszeitraum werden dazu entsprechend Abschnitt 8 $n = 26$ Wochen empfohlen.

Für verkehrsnahen PM_{10} -Messstationen ist der (mittlere) Wochengang der Korrekturwerte deutlich weniger ausgeprägt und zwischen den Stationen deutlich variabler als bei NO_2 , wie in Abbildung 3 zu sehen ist. Die Untersuchungen in Abschnitt 8 haben hier gezeigt, dass sich die Verwendung der Wochentagskorrektur an verkehrsnahen PM_{10} -Messstationen deutlich neutraler, zum Teil auch negativ auf die Prognosegüte auswirkt. So wurden für Korrelationskoeffizient und Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ an einzelnen Stationen Verbesserungen um bis zu einem Prozentpunkt (Korrelation) bzw. 12 Prozentpunkte (Hit Rate), an anderen Stationen aber Verschlechterungen um bis zu 5 Prozentpunkte (Korrelation) bzw. 22 Prozentpunkte (Hit Rate) beobachtet. Eine Verwendung der Wochentagskorrektur im Zusammenhang mit der Hybrid-Vorhersage wird daher für verkehrsnahen PM_{10} -Messstationen nicht empfohlen.

Abbildung 3: Wochentagsgemittelte Korrekturwerte der Hybrid-Vorhersage für die stündlichen PM10-Zeitreihen der CAMS-Prognose, 2019, am Beispiel einiger verkehrsnaher Messstandorte



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

4.3 Feiertagskorrektur

Um den Einfluss von Feier- und Ferientagen auf die Konzentration an verkehrsnahen Messstationen untersuchen zu können, wurden drei verschiedenen Tagestypen definiert: Feiertage, Ferientage und alle anderen Tage, sogenannte „Normaltage“. Die Zuordnung der betrachteten Tage zu den drei Tagestypen erfolgte bundeslandweise.

Als Grundlage für die Definition eines Tages als Feier- oder Ferientag wurde die Seite <https://www.schulferien.org/> herangezogen. Hintergrund der Einteilung ist die Idee, dass Ferien-, Feier- und Normaltage im Mittel jeweils unterschiedliche Verkehrscharakteristiken aufweisen. Vor diesem Hintergrund wurden für die Einteilung nach Tagestypen folgende Festlegungen getroffen:

- ▶ Ein Feiertag ist dadurch gekennzeichnet, dass er alleinstehend ist und sich nicht in den Ferienzeiten befindet.
- ▶ Feiertage innerhalb der Schulferien (Weihnachten, Ostern, ...) werden als Ferientage klassifiziert. Beispiel Pfingstmontag: Ist der Pfingstmontag in einem Bundesland mit Ferientagen verknüpft, wird er auch als Ferientag gewertet, ansonsten als Feiertag.
- ▶ Wochenenden direkt vor oder im Anschluss an Schulferien werden als Ferientage klassifiziert, da diese Wochenenden häufig bereits im Rahmen der Ferien genutzt werden.

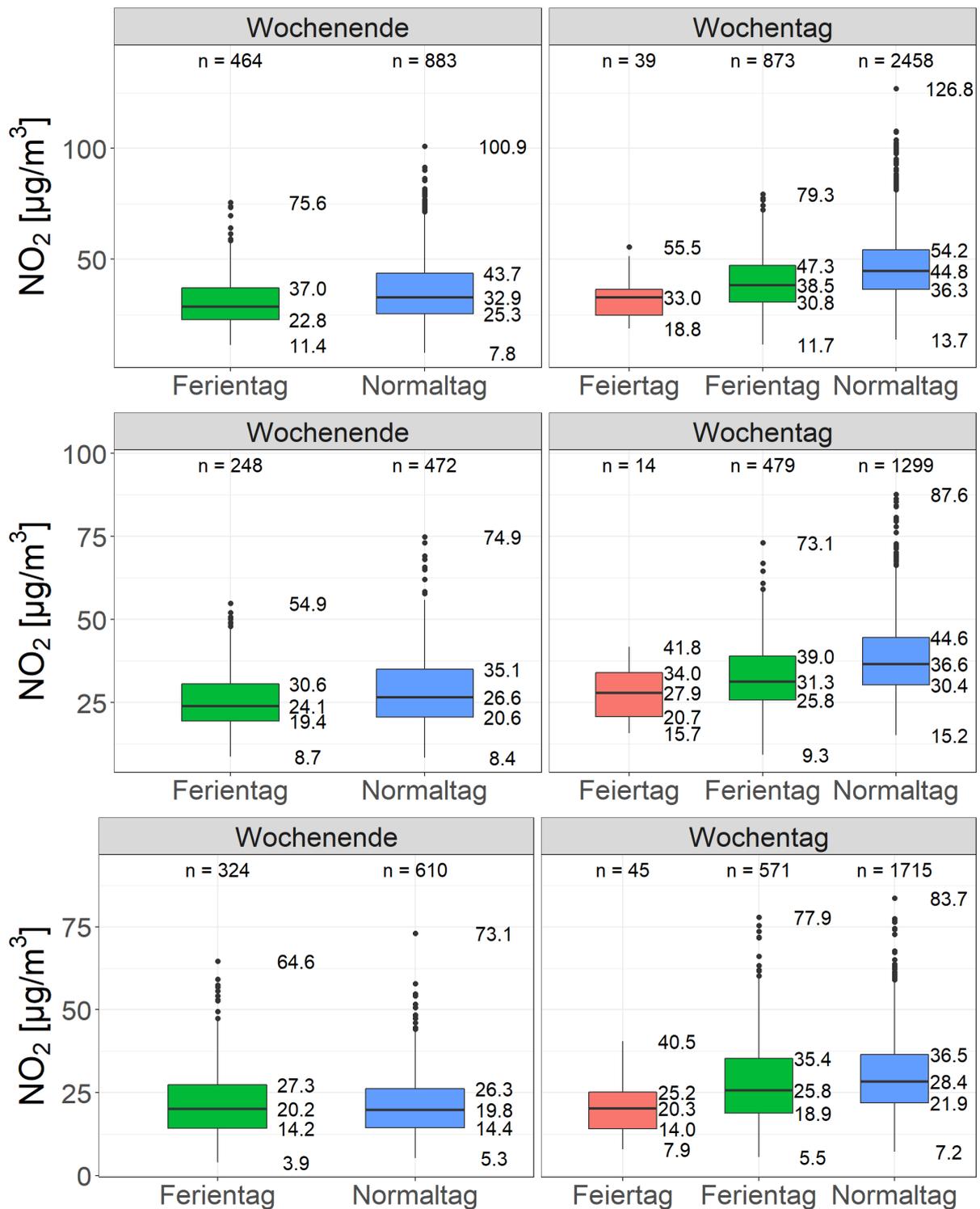
- ▶ Brückentage werden als Normaltage klassifiziert. Ausnahme: Ist der Brückentag in einem Bundesland ein offiziell unterrichtsfreier Tag, dann wird er zusammen mit dem umgebenden Feiertag und Wochenende als Ferientag gewertet.

Die Einteilung der Tagestypen auf Basis der oben genannten Kriterien ist nicht immer eindeutig. Es wird empfohlen, bei der Erstellung der Liste für Sonder- und Zweifelsfälle eine begründete Entscheidung zu treffen und diese zu dokumentieren.

Untersuchungen des mittleren Konzentrationsniveaus der Tagesmittelwerte der NO₂- und PM₁₀-Messdaten an verkehrsnahen Messstationen für die verschiedenen Tagestypen haben für NO₂ über alle Bundesländer eine klare Tendenz ergeben, dass das Konzentrationsniveau an Feiertagen niedriger als an Ferientagen und an Ferientagen wiederum niedriger als an Normaltagen ist. Abbildung 4 zeigt dies beispielhaft für Baden-Württemberg, Niedersachsen und Sachsen. Die Unterschiede zum Normaltag sind dabei an den Wochentagen größer als an den Wochenenden. Für die PM₁₀-Messdaten zeigt sich diese Tendenz nicht in dieser Deutlichkeit, insbesondere unterscheiden sich die Verhältnisse der Konzentrationsniveaus der einzelnen Tagestypen zueinander zwischen den Bundesländern, so dass kein einheitliches Muster erkennbar wird (Abbildung 5).

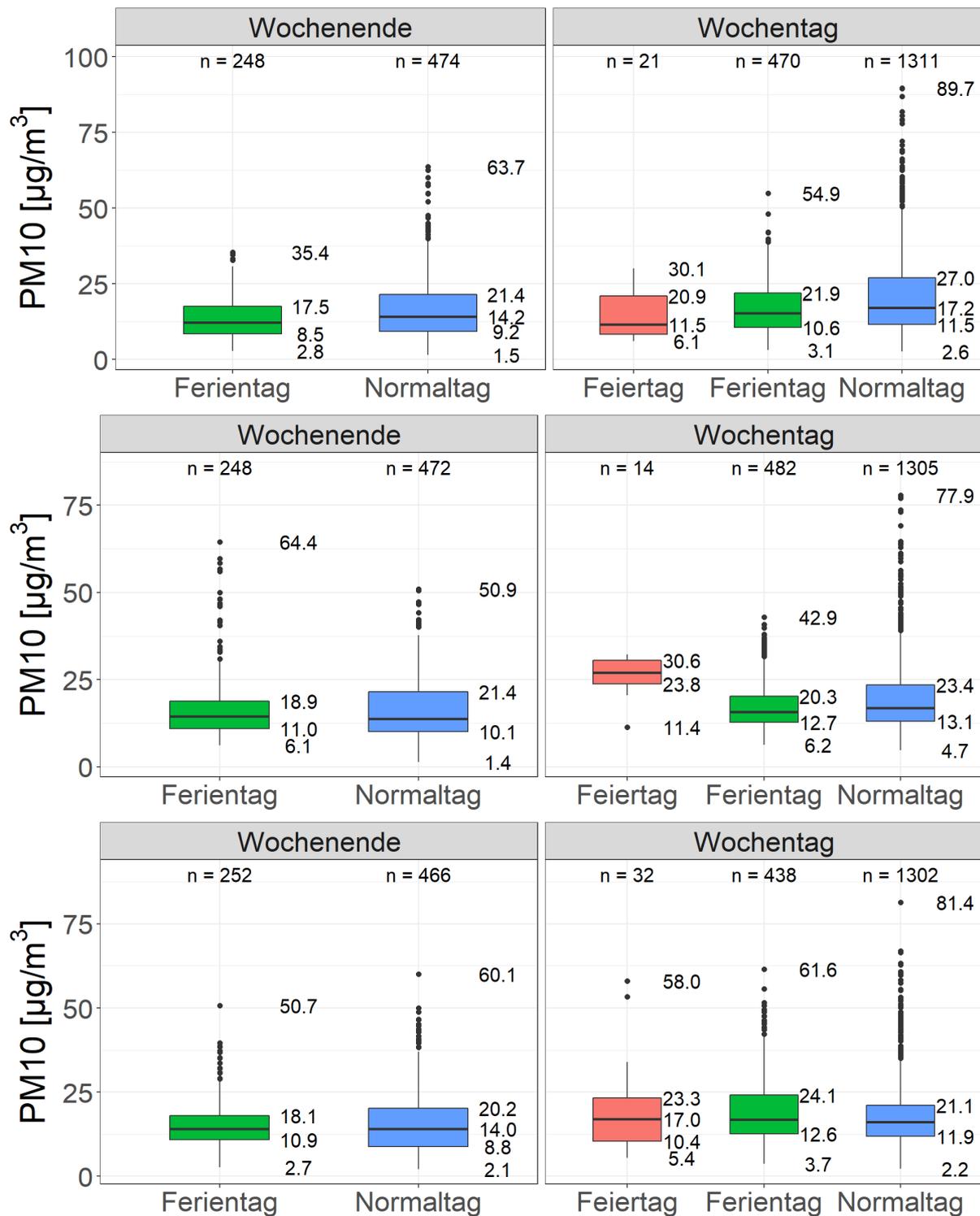
Eine entsprechende Auswertung für die CAMS-Prognosedaten an den verkehrsnahen Messstandorten zeigt, dass die für die NO₂-Messdaten beschriebene Tendenz der Konzentrationsniveaus in Abhängigkeit vom Tagestyp von den CAMS-Daten nicht wiedergegeben wird (Abbildung 6). Für PM₁₀ gilt, dass sich die Verhältnisse der Konzentrationsniveaus der einzelnen Tagestypen zueinander für die CAMS-Prognosen wie für die Messwerte zwischen den Bundesländern unterscheiden, und dass zudem die Konzentrationsniveaus der CAMS-Prognosen für die einzelnen Tagestypen pro Bundesland häufig andere Verhältnisse zueinander zeigen als die entsprechenden Konzentrationsniveaus der Messdaten (Abbildung 7, vgl. mit Abbildung 5).

Abbildung 4: Konzentrationsniveau der Tagesmittelwerte der NO₂-Messdaten 2019 an verkehrsnahen Messstationen in Abhängigkeit vom Tagestyp und unterteilt nach Wochentag und Wochenende, beispielhaft für Baden-Württemberg (oben), Niedersachsen (Mitte) und Sachsen (unten).



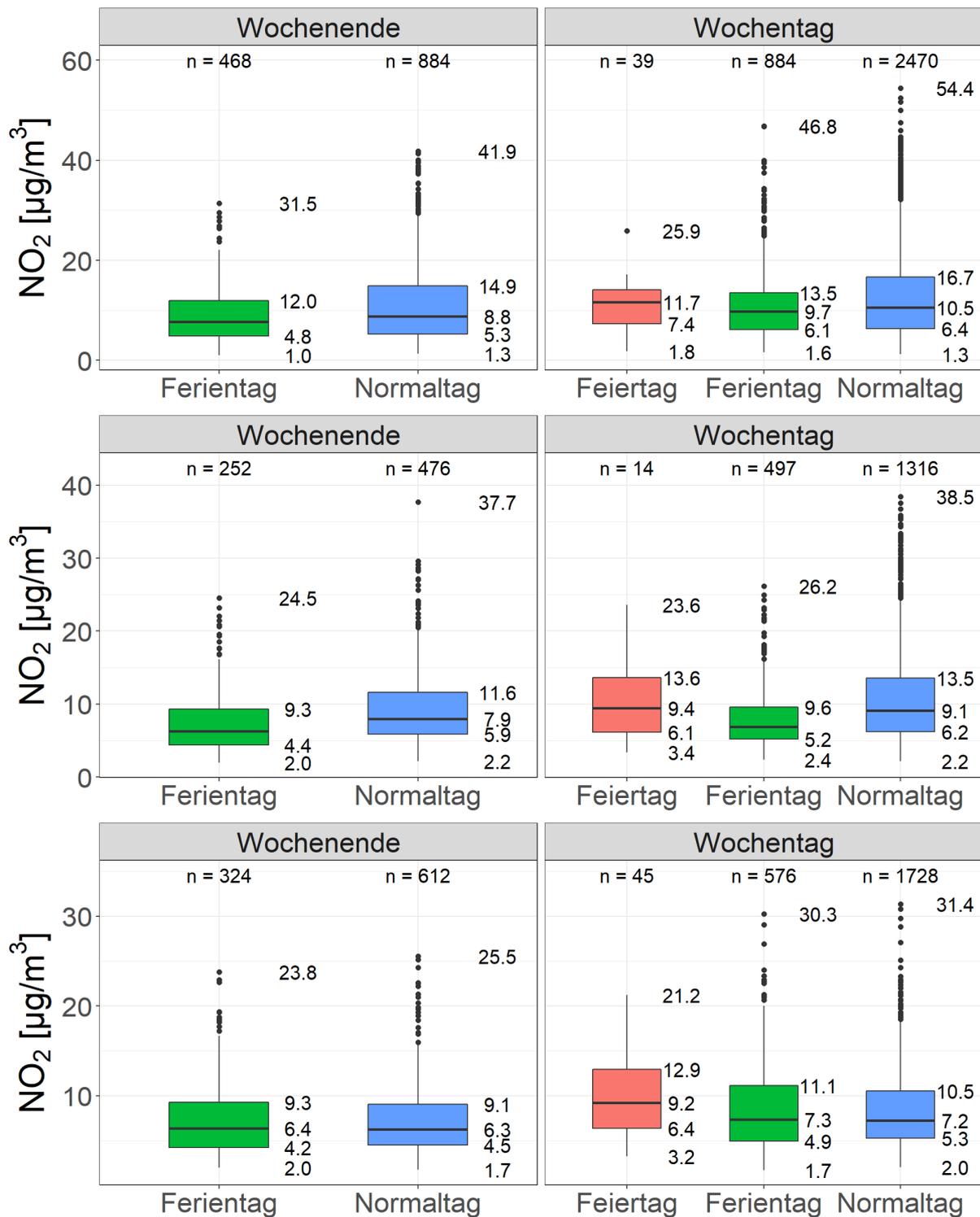
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 5: Konzentrationsniveau der Tagesmittelwerte der PM₁₀-Messdaten 2019 an verkehrsnahen Messstationen in Abhängigkeit vom Tagestyp und unterteilt nach Wochentag und Wochenende, beispielhaft für Baden-Württemberg (oben), Niedersachsen (Mitte) und Sachsen (unten).



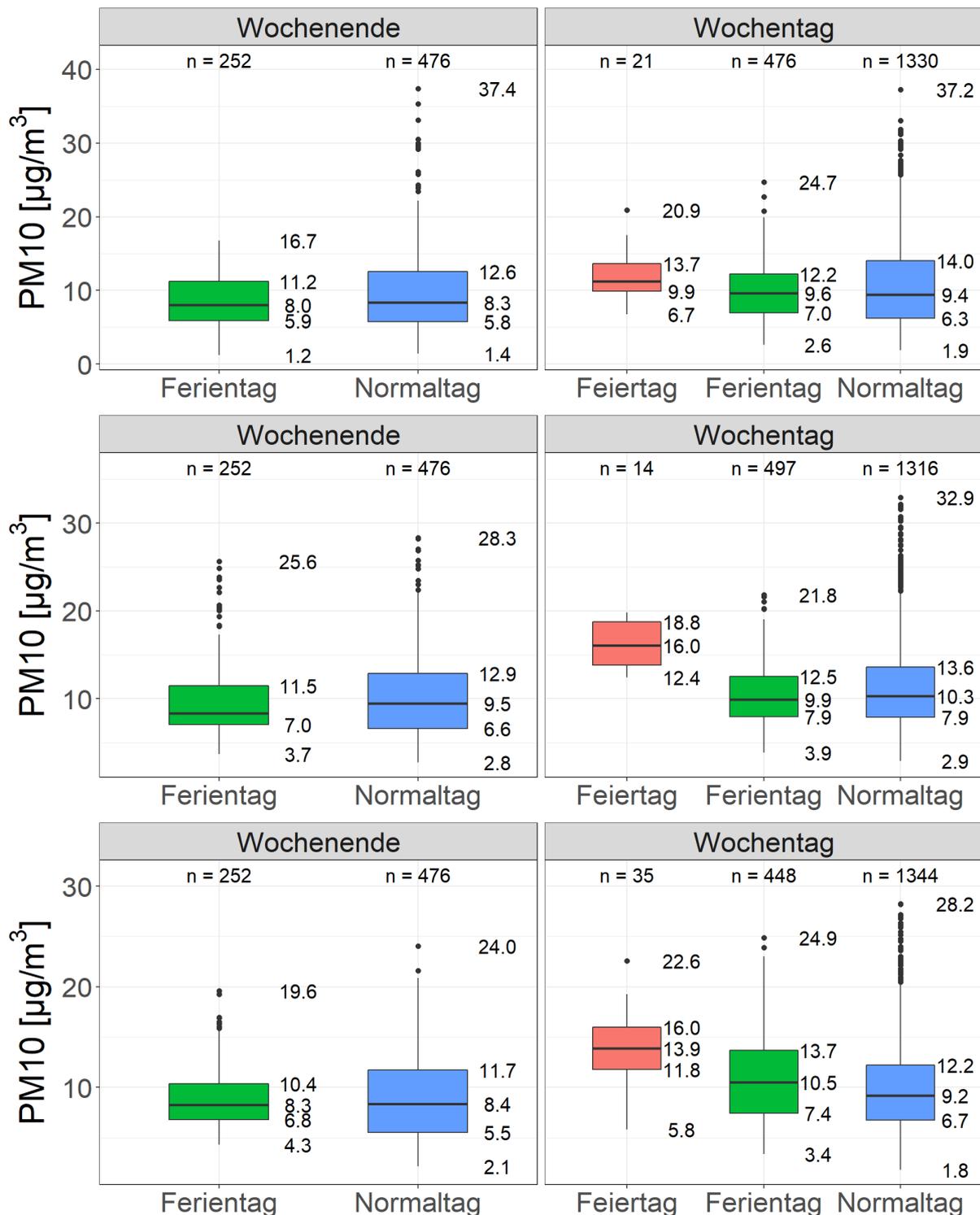
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 6: Konzentrationsniveau der Tagesmittelwerte der NO₂-CAMS-Prognosedaten 2019 an verkehrsnahen Messstationen in Abhängigkeit vom Tagestyp und unterteilt nach Wochentag und Wochenende, beispielhaft für Baden-Württemberg (oben), Niedersachsen (Mitte) und Sachsen (unten).



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 7: Konzentrationsniveau der Tagesmittelwerte der PM₁₀-CAM5-Prognosedaten 2019 an verkehrsnahen Messstationen in Abhängigkeit vom Tagestyp und unterteilt nach Wochentag und Wochenende, beispielhaft für Baden-Württemberg (oben), Niedersachsen (Mitte) und Sachsen (unten).



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Vor dem Hintergrund dieser Auswertungen wurde für NO₂ analog zur Wochentagskorrektur (Abschnitt 4.2) eine Feiertagskorrektur entwickelt, die auf Feiertage unter der Woche (Montag bis Freitag) angewendet wird und diese Feiertage wie einen Sonntag aus der Wochentags-

korrektur behandelt. Die Feiertagskorrektur kann alleine oder in Kombination mit der Wochentagskorrektur auf die Hybrid-Vorhersage angewendet werden.

Liegt der Feiertag beispielsweise auf einem Donnerstag i und die Feiertagskorrektur wird alleine auf die Hybrid-Vorhersage angewendet, so wird der mit der Hybrid-Vorhersage bestimmte Korrekturfaktor $KF_{Do,i}$ (der den Fehler von Mittwoch enthält) neu berechnet, indem ein Feiertagskorrekturfaktor $HD_{Do,i}$ addiert wird:

$$KF_{Do,i,HD} = KF_{Do,i} + HD_{Do,i} \quad (4)$$

Der Feiertagskorrekturfaktor $HD_{Do,i}$ wird dazu berechnet als Mittelwert der Differenzen der Korrekturfaktoren zwischen Montag (die den Fehler von Sonntag enthalten) und Donnerstag (die den Fehler von Mittwoch enthalten) über n zurückliegende Wochen:

$$HD_{Do,i} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (KF_{Mo,i-j} - KF_{Do,i-j}) \quad (5)$$

Wird die Feiertagskorrektur in Kombination mit der Wochentagskorrektur auf die Hybrid-Vorhersage angewendet, so wird der mit der Hybrid-Vorhersage bestimmte und bereits wochentagskorrigierte Korrekturfaktor $KF_{Do,i,WD}$ (der jetzt den Fehler von Donnerstag enthält) ebenfalls neu berechnet, indem ein Feiertagskorrekturfaktor $HD_{Do,i}$ addiert wird:

$$KF_{Do,i,WDHD} = KF_{Do,i,WD} + HD_{Do,i} \quad (6)$$

In diesem Fall bestimmt sich der Feiertagskorrekturfaktor $HD_{Do,i}$ aber als Mittelwert der Differenzen der Korrekturfaktoren zwischen Sonntag (die jetzt den Fehler von Sonntag enthalten) und Donnerstag (die den Fehler von Donnerstag enthalten) über n zurückliegende Wochen:

$$HD_{Do,i} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (KF_{So,i-j} - KF_{Do,i-j}) \quad (7)$$

Ziel ist es, den Korrekturfaktor der reinen bzw. der wochentagskorrigierten Hybrid-Vorhersage, der den Fehler von Mittwoch bzw. Donnerstag enthält, in einen Korrekturfaktor zu überführen, der den Fehler von Sonntag enthält. Dies gilt für Feiertage an anderen Tagen unter der Woche entsprechend. Die Korrektur der Korrekturfaktoren erfolgt in beiden Fällen wie bei der Wochentagskorrektur stundengenau.

Basierend auf den Untersuchungen in Abschnitt 9 wird analog zur Wochentagskorrektur ein Mittelungszeitraum über mindestens $n = 12$, besser $n = 26$ Wochen zur Bestimmung von HD empfohlen. Der volle Mittelungszeitraum steht dabei auch hier erst ab der $n+1$ -sten Woche, für die eine Prognose durchgeführt wird, zur Verfügung, davor wird der jeweils maximal mögliche Mittelungszeitraum verwendet.

Der Einfluss der Feiertagskorrektur auf die für die Evaluierung verwendeten Metriken gemäß Abschnitt 5.1 ist bezogen auf ein ganzes Jahr von untergeordneter Bedeutung. Für die einzelnen Feiertage unter der Woche ist er aber durchaus relevant. In Abschnitt 9 wird gezeigt, dass der Korrelationskoeffizient über einen Zeitraum von 6 Wochen im Mai und Juni 2019, in dem 3 Feiertage unter der Woche auftraten, durch die Feiertagskorrektur an einzelnen Stationen gegenüber der reinen und der wochentagskorrigierten Hybrid-Vorhersage um 3 bis 4 Prozentpunkte verbessert wurde. Insofern wird die Anwendung der Feiertagskorrektur im Zusammenhang mit der Hybrid-Vorhersage mit $n_{Vorlauf} = 1$ für verkehrsnahen NO_2 -Messstationen grundsätzlich empfohlen, vor allem auch in Kombination mit der Wochentagskorrektur. Für verkehrsnahen PM_{10} -Messstationen hingegen, für die die oben beschriebenen Auswertungen der mittleren Konzentrationsniveaus der Tagesmittelwerte der Messdaten keine einheitlichen Tendenzen hinsichtlich der Verhältnisse der Konzentrationsniveaus der einzelnen Tagestypen zueinander ergeben haben, wird die Anwendung der Feiertagskorrektur nicht empfohlen.

4.4 Lineare Modelle

4.4.1 Allgemeines

Um zu untersuchen, inwieweit Tagesganglinien z. B. des Verkehrs für die NO₂-Prognose an verkehrsnahen Messstandorten genutzt werden können, wurden am Beispiel der Station DEBE065 (Berlin, Frankfurter Allee) verschiedene Lineare Modelle entwickelt und evaluiert. Für die Untersuchungen wurde im Rahmen dieses Projektes ausschließlich der Luftschadstoff NO₂ betrachtet, weil hier von einem großen Einfluss des Emissionsbeitrags des lokalen Verkehrs auf die gemessenen NO₂-Konzentrationen ausgegangen werden kann.

Grundlage der Linearen Modelle war jeweils eine Multivariate Regressionsanalyse verschiedener Eingangsgrößen. Als mögliche Eingangsgrößen wurden die stündliche Ganglinie des Kfz-Verkehrs 2019 für die Frankfurter Allee (S-VELD, 2022), stündliche Zeitreihen der Windgeschwindigkeit und -richtung 2019 der DWD-Messstation Berlin-Tempelhof, die von der Open-Data-Plattform des DWD² heruntergeladen wurden, sowie der Wochentag und die Stunde des Tages herangezogen.

Die Untersuchungen erfolgten in zwei Schritten:

- ▶ Im ersten Schritt wurde untersucht, wie stark der Zusammenhang zwischen den im Jahr 2019 gemessenen NO₂-Konzentrationen und den betrachteten Eingangsgrößen ist (Abschnitt 4.4.2).
- ▶ Im zweiten Schritt wurde untersucht, wie stark der Zusammenhang zwischen den Differenzen zwischen den CAMS-Prognosen für 2019 und den im Jahr 2019 gemessenen NO₂-Konzentrationen und den betrachteten Eingangsgrößen ist (Abschnitt 4.4.3).

Der zweite Schritt wurde anschließend durch eine Kombination verschiedener Linearer Modelle erweitert (Abschnitt 4.4.4).

Die Untersuchungen wurden zunächst auf der Basis zurückliegender, d. h. gemessener Daten durchgeführt (siehe Abschnitt 10.1.2), um zu prüfen, wie stark der Zusammenhang zwischen NO₂ und den betrachteten Eingangsgrößen im besten Fall ist und wie gut die darauf basierenden Prognosen im Vergleich mit den oben beschriebenen Korrekturverfahren (Abschnitt 4.1 bis 4.3) sind. Im Hinblick auf eine operationelle Anwendung des Verfahrens in der Prognose wurden anschließend zwei Sensitivitätsstudien durchgeführt:

- ▶ Untersuchung des Einflusses der Verwendung typisierter Kfz-Daten (Abschnitt 10.1.3)
- ▶ Untersuchung des Einflusses der Verwendung prognostizierter statt gemessener meteorologischer Eingangsdaten, basierend auf MOSMIX-Daten des DWD (Abschnitt 10.1.4)

Anschließend wurden die entwickelten Ansätze exemplarisch auf eine Handvoll weiterer Stationen angewendet (Abschnitt 10.2 bis Abschnitt 10.6). Für die Evaluierung der verschiedenen Linearen Modelle wurden die statistischen Kennwerte aus Abschnitt 5.1 berechnet.

4.4.2 Prognose der NO₂-Konzentration

Für die Multivariate Regressionsanalyse wird davon ausgegangen, dass die betrachteten Eingangsgrößen in erster Näherung voneinander unabhängig sind, und dass der Zusammenhang

² https://opendata.dwd.de/climate_environment/CDC/observations_germany/climate/hourly/wind/

zwischen dem Schätzer der abhängigen Variable C und jeder der betrachteten Eingangsgrößen x_k linear ist:

$$C = b_0 + b_1 * x_1 + b_2 * x_2 + \dots + b_k * x_k \quad (8)$$

mit

C : Schätzer der abhängigen Variable (hier: NO₂-Konzentration am Ort der betrachteten Messstation)

x_k : unabhängige Variable k

b_k : Regressionskoeffizient der Variable k

Die hier betrachteten Eingangsgrößen sind, wie in Abschnitt 4.4.1 ausgeführt, eine stündliche Ganglinie des Kfz-Verkehrs, im Folgenden mit der Kurzform KFZ bezeichnet, stündliche Zeitreihen der Windgeschwindigkeit und -richtung (WiGe und WiRi), sowie der Wochentag (WoTag) und die Stunde des Tages (Std). Die zyklische Variable "Windrichtung" wurde für die Regression in acht Dummy-Variablen, entsprechend den 45°-Sektoren, umgewandelt. Die Dummy-Variable für den Sektor von 0° bis 45° ist "Eins", wenn der Wind aus der Richtung von 0° bis 45° kommt, sonst "Null". Die anderen sieben Windrichtung-Dummies werden entsprechend behandelt. Analog wurden auch für den Wochentag und die Stunde des Tages Dummy-Variablen eingeführt.

Tabelle 3 zeigt das adjustierte Bestimmtheitsmaß R^2 für verschiedene Lineare Modelle zur Prognose der NO₂-Konzentration an, die auf unterschiedlichen Kombinationen der betrachteten Eingangsgrößen beruhen. Werden die Linearen Modelle in Abhängigkeit von nur einer der Eingangsgrößen erstellt, so ergibt sich für den Kfz-Verkehr (Modell-Nr. 1) mit 0.265 das höchste Bestimmtheitsmaß, d. h., es werden knapp 27 % der Variation in der NO₂-Konzentration an der Station DEBE065 durch die Variation in der verwendeten Kfz-Ganglinie erklärt. Der Kfz-Verkehr in Kombination mit Windgeschwindigkeit (Modell-Nr. 6) oder Windrichtung (Modell-Nr. 7) erklärt rund 40 % der Variation in der NO₂-Konzentration. Kfz-Verkehr, Windgeschwindigkeit und Windrichtung zusammen (Modell-Nr. 11) erklären rund 54 % und in Kombination mit dem Wochentag rund 56 % (Modell-Nr. 15). Das maximale Bestimmtheitsmaß von 0.585 ergibt sich, wenn alle betrachteten Eingangsgrößen für das Lineare Modell verwendet werden (Modell-Nr. 17). Ohne Kfz-Ganglinie, d. h. mit Windgeschwindigkeit, Windrichtung, Wochentag und Stunde des Tages, ergibt sich ein Bestimmtheitsmaß von immerhin knapp 0.5 (Modell-Nr. 16), d. h. die Berücksichtigung der Tagesstunde erhöht den Erklärungswert des Linearen Modells um knapp 20 Prozentpunkte gegenüber dem Linearen Modell, das nur auf Windgeschwindigkeit, Windrichtung und Wochentag beruht (Modell-Nr. 14). Die gefundenen Zusammenhänge sind dabei im Regelfall statistisch signifikant, Ausnahmen bilden einzelne Tagesstunden oder Wochentage.

Tabelle 3: Bestimmtheitsmaß für verschiedene Lineare Modelle zur Prognose der NO₂-Konzentration in Abhängigkeit der betrachteten Eingangsgrößen (DEHE065, 2019)

Modell-Nr.	Betrachtete Eingangsgrößen	Bestimmtheitsmaß R ²
1	KFZ	0.265
2	WiGe	0.083
3	WiRi	0.157
4	WoTag	0.085
5	Std	0.145
6	KFZ, WiGe	0.416
7	KFZ, WiRi	0.406
8	KFZ, WoTag	0.290
9	WiGe, WiRi	0.230
10	Std, WoTag	0.230
11	KFZ, WiGe, WiRi	0.544
12	KFZ, WiGe, WoTag	0.442
13	KFZ, WiRi, WoTag	0.426
14	WiGe, WiRi, WoTag	0.307
15	KFZ, WiGe, WiRi, WoTag	0.563
16	WiGe, WiRi, Std, WoTag	0.499
17	Kfz, WiGe, WiRi, Std, WoTag	0.585

4.4.3 Prognose der Differenzen zwischen den CAMS-Prognosen und der NO₂-Konzentration

Alternativ zu dem Vorgehen in Abschnitt 4.4.2 wurde mit Hilfe der Multivariaten Regressionsanalyse nicht die NO₂-Konzentration selbst am Stationsort geschätzt, sondern die Differenz zwischen der CAMS-Prognose für NO₂ am Stationsort und der NO₂-Konzentration:

$$\Delta C = d_0 + d_1 * x_1 + d_2 * x_2 + \dots + d_k * x_k \quad (9)$$

mit

ΔC : Schätzer der abhängigen Variable (hier: Differenz zwischen der CAMS-Prognose für NO₂ und der NO₂-Konzentration, jeweils am Ort der betrachteten Messstation)

x_k : unabhängige Variable k

d_k : Regressionskoeffizient der Variable k

Die hier betrachteten Eingangsgrößen sind, analog zu Abschnitt 4.4.2, eine stündliche Ganglinie des Kfz-Verkehrs, stündliche Zeitreihen der Windgeschwindigkeit und -richtung sowie der Wochentag und die Stunde des Tages. Windrichtung, Wochentag und Stunde wurden wie in Abschnitt 4.4.2 über Dummy-Variablen berücksichtigt. Die NO₂-Konzentration am Stationsort

wird dann für jede Stunde des Prognosezeitraums geschätzt, indem die CAMS-Prognose für NO₂ am Stationsort und die mit dem Linearen Modell prognostizierte Differenz zwischen der CAMS-Prognose und der NO₂-Konzentration aufaddiert werden:

$$C_{mod}^{korr} = C_{mod} + \Delta C \quad (10)$$

Dieses Vorgehen wird im Folgenden als „LM-Delta-Ansatz“ bezeichnet. Im Unterschied zur Hybrid-Vorhersage (siehe Abschnitt 4.1) wird dabei die Differenz zwischen Messung und Modell zum Prognosezeitpunkt t nicht aus der Differenz zwischen Messung und Modell von n Vorlauf Tagen zuvor berechnet, sondern durch das Lineare Modell auf Basis der gewählten Eingangsgrößen.

Tabelle 4 zeigt das adjustierte Bestimmtheitsmaß R^2 für verschiedene Lineare Modelle zur Prognose der Differenz zwischen der CAMS-Prognose für NO₂ am Stationsort und der NO₂-Konzentration gemäß Gleichung (9). Die Linearen Modelle wenden die gleichen Kombinationen der betrachteten Eingangsgrößen an, die auch in Abschnitt 4.4.2 zur direkten Prognose der NO₂-Konzentrationen verwendet wurden. Analog zu Tabelle 3 ergibt sich auch hier bei Betrachtung einzelner Eingangsgrößen das höchste Bestimmtheitsmaß für den Kfz-Verkehr (Modell-Nr. 1), es ist für die Prognose der Differenz zwischen der CAMS-Prognose für NO₂ am Stationsort und der NO₂-Konzentration mit 0.354 sogar deutlich höher als für die Prognose der NO₂-Konzentration selbst, für die das Bestimmtheitsmaß zu 0.265 (Tabelle 3) berechnet wurde. Der Kfz-Verkehr erklärt in Kombination mit der Windgeschwindigkeit knapp 39 % und in Kombination mit der Windrichtung knapp 45 % der Variation in den Differenzen zwischen der CAMS-Prognose für NO₂ am Stationsort und der NO₂-Konzentration. Kfz-Verkehr, Windgeschwindigkeit und Windrichtung zusammen weisen ein adjustiertes Bestimmtheitsmaß von 0.486 und in Kombination mit dem Wochentag von 0.505 auf. Das maximale Bestimmtheitsmaß von 0.52 ergibt sich wie für die Prognose der NO₂-Konzentration selbst bei Berücksichtigung aller betrachteten Eingangsgrößen (Modell-Nr. 17). Ohne Kfz-Ganglinie ergibt sich das höchste Bestimmtheitsmaß mit 0.424 für die Kombination aller anderen Eingangsgrößen, d. h. Windgeschwindigkeit, Windrichtung, Wochentag und Stunde des Tages (Modell-Nr. 16). Lineare Modelle mit höherem Bestimmtheitsmaß (Modell-Nr. 11, 15, 16 und 17) weisen damit bei der Prognose der Differenzen zwischen der CAMS-Prognose für NO₂ am Stationsort und der NO₂-Konzentration in der Regel ein etwas niedrigeres Bestimmtheitsmaß auf als bei der Prognose der NO₂-Konzentration selbst (Tabelle 3). Die gefundenen Zusammenhänge sind dabei wie in Abschnitt 4.4.2 im Regelfall statistisch signifikant, Ausnahmen bilden auch hier einzelne Tagesstunden oder Wochentage.

Tabelle 4: Bestimmtheitsmaß für verschiedene Lineare Modelle zur Prognose der Differenzen zwischen den CAMS-Prognosen für NO₂ am Stationsort und den NO₂-Konzentrationen in Abhängigkeit der betrachteten Eingangsgrößen

Modell-Nr.	Betrachtete Eingangsgrößen	Bestimmtheitsmaß R ²
1	KFZ	0.354
2	WiGe	0.004
3	WiRi	0.111
4	WoTag	0.096
5	Std	0.201
6	KFZ, WiGe	0.386
7	KFZ, WiRi	0.449
8	KFZ, WoTag	0.379
9	WiGe, WiRi	0.117
10	Std, WoTag	0.298
11	KFZ, WiGe, WiRi	0.486
12	KFZ, WiGe, WoTag	0.412
13	KFZ, WiRi, WoTag	0.469
14	WiGe, WiRi, WoTag	0.199
15	KFZ, WiGe, WiRi, WoTag	0.505
16	WiGe, WiRi, Std, WoTag	0.424
17	Kfz, WiGe, WiRi, Std, WoTag	0.520

4.4.4 Kombination verschiedener Linearer Modelle

Die Linearen Modelle aus Abschnitt 4.4.2 und insbesondere Abschnitt 4.4.3 konnten erfolgreich für die Prognose der NO₂-Konzentration an Stationsorten eingesetzt werden (siehe Abschnitt 10.1.2.1 und Abschnitt 10.1.2.2). Allerdings unterschätzten alle bisher untersuchten Linearen Modelle im Regelfall die Maximalwerte der NO₂-Konzentrationen, so dass die Hit Rate für den Schwellenwert 100 µg/m³ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“) gering ist.

Um die Maximalwerte besser zu erfassen, wurden testweise die Ergebnisse der Lineare Modelle aus Abschnitt 4.4.3 mit den Ergebnissen eines zweiten Linearen Modells kombiniert. Für das zweite Lineare Modell wurden für die Schätzung der Regressionskoeffizienten nur diejenigen Tagesstunden herangezogen, in denen 5 % oder mehr der Fälle auftraten, in denen die Differenz zwischen CAMS-Prognose am Stationsort und NO₂-Konzentration > 50 µg/m³ war. An der exemplarisch untersuchten Station DEBE065 galt das für die Tagesstunden 7:00 Uhr bis 10:00 Uhr MEZ sowie 14:00 Uhr bis 17 Uhr MEZ. Für die genannten Tagesstunden wurden dann die berechneten Differenzen aus dem zweiten Linearen Modell mit den für die spezifischen Tagesstunden gültigen Regressionskoeffizienten übernommen, während für die anderen Tagesstunden die berechneten Differenzen aus dem ersten Linearen Modell mit den für alle Tagesstunden gültigen Regressionskoeffizienten verwendet wurden. Die NO₂-Konzentration am Stationsort wurde dann analog zu Abschnitt 4.4.3 gemäß Gleichung (10) für jede Stunde des

Prognosezeitraums geschätzt, indem die CAMS-Prognose für NO₂ am Stationsort und die je nach Tagesstunde mit einem der beiden Linearen Modelle prognostizierte Differenz zwischen der CAMS-Prognose und der NO₂-Konzentration aufaddiert wurden.

5 Verwendete Evaluierungsansätze

5.1 Statistische Kennwerte

Der Satz statistischer Kennwerte, der in der Testumgebung zum Zwecke der Evaluierung der unkorrigierten und der korrigierten Prognosedaten an den Messorten implementiert ist, wurde gegenüber IVU Umwelt (2018) nicht verändert. Seine Beschreibung wurde daher im Wesentlichen aus IVU Umwelt (2018) übernommen und wird hier im Folgenden nochmals aufgeführt.

Die Testumgebung berechnet die in Tabelle 5 aufgeführten statistischen Kennwerte (Metriken). Die Metriken werden für jede Station einzeln bestimmt und in Box-Whisker-Plots zusammengeführt, um die Spannweite der Metriken darzustellen.

Tabelle 5: Verwendete statistische Kennwerte / Metriken

Bezeichnung	Abkürzung
Minimum der Messwerte	Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Minimum der Modellwerte	Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Mittelwert der Messwerte	Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Mittelwert der Modellwerte	Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Maximum der Messwerte	Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Maximum der Modellwerte	Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Standardabweichung der Messwerte	SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Standardabweichung der Modellwerte	SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Korrelationskoeffizient nach Pearson	Korrelation [-]
Root Mean Square Error	RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Bias	BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Mean Fractional Bias	MFB [%]
Fractional Gross Error	FGE [%]
Anzahl der gemessenen Überschreitungen	MeasExc [-]
Hit Rate	Hit Rate [%]
False Alarm Rate	FAR [%]

Vergleich von Minimum, Mittelwert, Maximum und Standardabweichung zwischen Messung und Modell verschaffen einen ersten Überblick über die Güte der Modellergebnisse. Der Korrelationskoeffizient nach Pearson zeigt an, inwieweit der zeitliche Verlauf der Messdaten von den Modelldaten erfasst wird. Der Bias beschreibt den systematischen Fehler des Modells, d. h. ob das Modell die Messwerte über- oder unterschätzt. Der Root Mean Square Error (RMSE) erfasst sowohl den systematischen als auch unsystematische (zufällige) Fehler des Modells. Er repräsentiert die Standardabweichung der Differenzen zwischen Messung und Modell und wird i. d. R. verwendet, um den Fehler verschiedener Modelle für einen bestimmten Datensatz zu

vergleichen. Für den Vergleich der Modellperformanz zwischen verschiedenen Datensätzen (z. B. verschiedene Schadstoffe) ist der RMSE nicht geeignet, da er skalenabhängig ist. Das gilt auch für den Bias. Weiterhin ist der RMSE sensitiv bezüglich Ausreißern, weil jede Abweichung zwischen Messung und Modell im Quadrat in den RMSE eingeht und damit größere Fehler einen überproportionalen Einfluss auf den RMSE haben.

Um eine skalenunabhängige Bewertung der Modellergebnisse zu erhalten, sind in der Testumgebung zwei weitere statistische Größen implementiert, der Mean Fractional Bias (MFB):

$$MFB = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N \frac{(c_m - c_o)}{(c_m + c_o)} \quad (11)$$

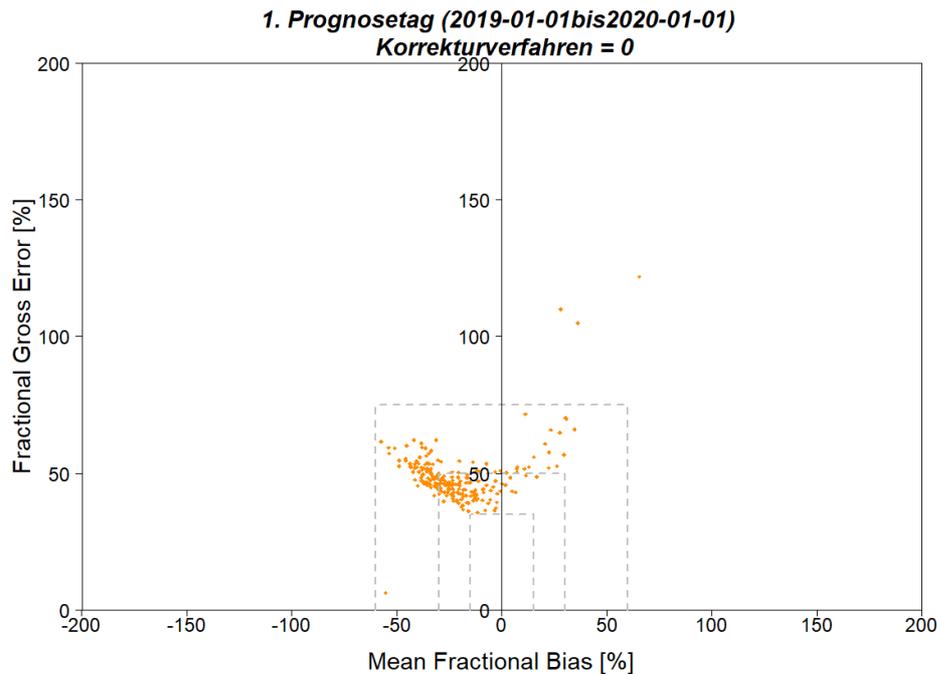
und der Fractional Gross Error (FGE):

$$FGE = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|c_m - c_o|}{(c_m + c_o)} \quad (12)$$

Dabei steht c_o für den Konzentrationswert der Messung der betrachteten Station und c_m für den entsprechenden Konzentrationswert des Modells am Ort der Messung. N ist die Anzahl der Zeitpunkte der betrachteten Messzeitreihe. Sowohl MFB als auch FGE werden mit Hilfe des Mittelwerts aus Messung und Modell normalisiert und sind damit unabhängig von der Skala des betrachteten Stoffs. Sie verhalten sich symmetrisch hinsichtlich Unter- und Überschätzung. Der MFB kann Werte zwischen -200 % und 200 % annehmen, optimal ist ein Wert von 0 %. Der FGE kann Werte zwischen 0 und 200 % annehmen, optimal ist auch hier ein Wert von 0 %.

Wird in einer Grafik der FGE über dem MFB aufgetragen, so erhält man eine Darstellung, die als „Soccer-Plot“ bezeichnet wird (Savage et al., 2013). Abbildung 8 zeigt beispielhaft einen Soccer-Plot für die unkorrigierten CAMS-Prognosen 2019 für PM₁₀ an Area-Messstationen. Jeder Punkt gibt den FGE und den MFB für eine der betrachteten Stationen wieder. Für eine perfekte Vorhersage läge der Punkt jeder Station im Ursprung der Grafik. Die drei eingezeichneten Boxen dienen der visuellen Orientierung, sie liegen analog zu Savage et al. (2013) bei 15 % / 35 %, 30 % / 50 % und 60 % / 75 %. Ein systematischer Fehler erscheint als eine lineare Gruppierung von Punkten. Eine Streuung der Punkte deutet hingegen darauf hin, dass zufällige Fehler dominieren. Diese Art der Darstellung erlaubt auf einen Blick die Charakterisierung der Modellfehler und die Einordnung der Vorhersagegüte des betrachteten Modells. Im vorliegenden Beispiel zeigen die meisten Messorte einen negativen Bias, eine geringere Anzahl Messorte weist auch einen positiven Bias auf. Die nur schwach lineare Gruppierung der Punkte der einzelnen Stationen deutet darauf hin, dass bei PM₁₀ eher zufällige Fehler in den CAMS-Prognosedaten dominieren.

Abbildung 8: Beispielhafte Darstellung eines Soccer-Plots, der den Fractional Gross Error aufgetragen zeigt über den Mean Fractional Bias (PM₁₀, Area-Stationen, 2019)



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Die bisher beschriebenen Metriken dienen der Bewertung der Vorhersagegüte eines Modells auf allen Konzentrationsniveaus. Diese Metriken sind jedoch nur bedingt geeignet, um die Vorsagegüte eines Modells hinsichtlich der Erfassung von Schwellenwertüberschreitungen zu beschreiben. Um dafür geeignete Metriken zu definieren, werden Mess- und Modellwerte entsprechend Abbildung 9 in vier Bereiche eingeteilt:

- ▶ A: korrekte Vorhersage einer Schwellenwertüberschreitung
- ▶ B: Schwellenwertüberschreitung vom Modell falsch vorhergesagt
- ▶ C: Schwellenwertüberschreitung vom Modell nicht erkannt
- ▶ D: korrekt erkannt, dass keine Schwellenwertüberschreitung stattgefunden hat

Daraus wird in der Testumgebung zur Orientierung zunächst die Anzahl der gemessenen Überschreitungen („measured exceedances“) bestimmt:

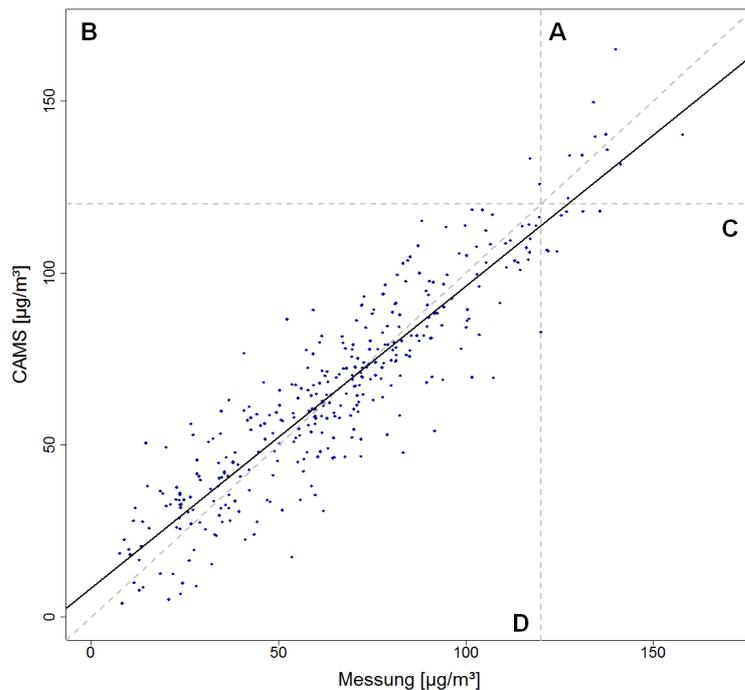
$$MeasExc = A + C \quad (13)$$

Des Weiteren werden die Hit Rate und die False Alarm Rate (FAR) ermittelt (Savage et al., 2013). Die Hit Rate gibt den Anteil korrekter Vorhersagen einer Schwellenwertüberschreitung an der Anzahl der gemessenen Schwellenwertüberschreitungen an, während die FAR den Anteil der vom Modell fälschlicherweise vorhergesagten Schwellenwertüberschreitungen an der Anzahl der gemessenen Werte unterhalb des Schwellenwerts angibt:

$$Hit\ Rate = 100 * A / (A + C) \quad [\%] \quad (14)$$

$$FAR = 100 * B / (B + D) \quad [\%] \quad (15)$$

Abbildung 9: Beispielhafte Darstellung der vier Quadranten A – D zur Bestimmung der Metriken zur Bewertung von Schwellenwertüberschreitungen. Näheres siehe Text.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

5.2 DELTA-Tool

In Erweiterung der statistischen Auswertung wurde zudem das im Rahmen der FAIRMODE-Initiative entstandene DELTA-Tool für „Assessment & Planning“ (A&P; Thunis & Cuvelier, 2020; Janssen & Thunis, 2020) in der Version 6.0.1 auf die originalen und auf die korrigierten CAMS-Prognosen angewendet. Seine Beschreibung wurde im Wesentlichen aus IVU Umwelt (2018) sowie aus IVU Umwelt (2023) übernommen und wird hier im Folgenden nochmals aufgeführt.

Das DELTA-Tool ist ein Analysetool, das Modellergebnisse im Vergleich mit Messungen statistisch bewertet. Entwickelt wird das DELTA-Tool im Rahmen der Arbeitsgruppe 1 (WG1 Assessment) des Europäischen Forums für Luftqualitätsmodellierung (FAIRMODE, Forum for air quality modelling in Europe, <http://fairmode.jrc.ec.europa.eu>), mit dem Ziel, Modellevaluierungen zu harmonisieren. Es werden Qualitätsziele für die Modellierung festgelegt und in Form des DELTA-Tools ein Analysewerkzeug bereitgestellt, mit dem Modellierungen im Vergleich mit Messungen nach den dort entwickelten Methoden statistisch bewertet werden können.

Die Qualität von Modellergebnissen wird im DELTA-Tool wesentlich mit Hilfe eines aggregierenden Modellierungsqualitäts-Indikators („modelling quality indicator“, MQI) beurteilt, der mit einem festgelegten Modellierungsqualitäts-Ziel („modelling quality objective“, MQO) verglichen wird. Die mathematischen Formulierungen dieser Größen können Thunis et al. (2012), Janssen & Thunis (2020) und Thunis & Cuvelier (2020) entnommen werden. Der MQI wird in Abhängigkeit der Messunsicherheiten der einzelnen Schadstoffkomponenten bestimmt, d. h. den Modellergebnissen wird ein Toleranzbereich zugeordnet, der vom Unsicherheitsbereich der Messungen abhängt.

Die Beurteilung der Güte der Modellierung über den MQI wird anhand dreier Kategorien vorgenommen:

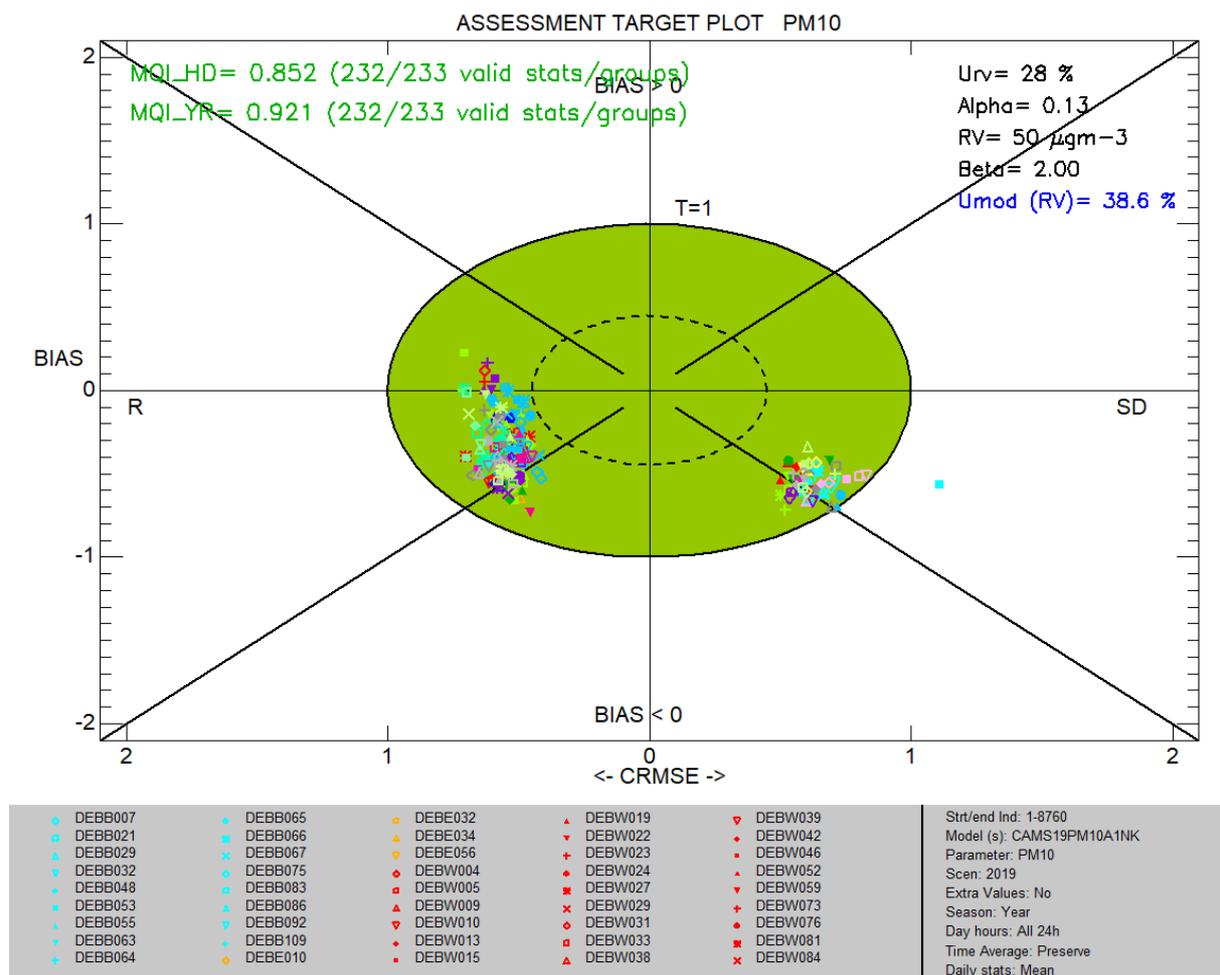
- ▶ $MQI \leq 0.5$. Der Unterschied zwischen Modellergebnissen und Messungen an einer Station ist kleiner als die Messunsicherheit. Die Modellergebnisse liegen damit im Mittel im Bereich der Messunsicherheit und erfüllen das Modellierungsqualitäts-Ziel. Eine Verbesserung der Modellgüte im Sinne einer „besseren“ Abbildung der Messungen ist nicht möglich.
- ▶ $0.5 < MQI \leq 1 = MQO$. Der Unterschied zwischen Modellergebnissen und Messungen an einer Station ist größer als die Messunsicherheit, die Unsicherheitsbereiche von Modellergebnissen und Beobachtungen überdecken sich. Damit ist das Modellergebnis noch in dem geforderten Bereich und erfüllt das Modellierungsqualitäts-Ziel.
- ▶ $MQI > 1$. Die Unterschiede zwischen Modellergebnissen und Beobachtungen sind signifikant. Das Modellierungsqualitäts-Ziel ist nicht erreicht.

Der MQI gibt einen allgemeinen Überblick zur Güte einer Modellierung. Zusätzliche statistische Parameter ermöglichen eine detailliertere Beurteilung der Güte und zeigen damit mögliche Aspekte einer Verbesserung der Modellierung auf. Die entscheidende Rolle bei allen statistischen Parametern spielt die Definition der Normierungsgröße, also des Unsicherheitsbereichs der Messungen. Für die Ableitung dieses Unsicherheitsbereiches wird auf die o. g. Quellen verwiesen. Die normierte Auswertung der statistischen Parameter wird im DELTA-Tool in einem zentralen Diagramm zum MQI, dem sogenannten „Assessment Target Plot“, und diversen zusammenfassenden Statistiken zu einzelnen Modellgüteindikatoren (Model Performance Indicators) dargestellt.

Die Assessment Target Plots wurden im Rahmen dieses Projekts für die Evaluierung sowohl der unkorrigierten als auch der korrigierten CAMS-Prognosen verwendet. Abbildung 10 zeigt beispielhaft eine solche Darstellung für die unkorrigierten CAMS-PM₁₀-Prognosen im Bezugsjahr 2019 an den Area-Stationen. Jeder farbige Punkt repräsentiert eine der betrachteten Stationen. Stationspunkte, die innerhalb der grünen Ellipse liegen, erfüllen die Bedingung „ $MQI \leq 1$ “, und Stationspunkte, die innerhalb der gestrichelten grünen Ellipse liegen, die Bedingung „ $MQI \leq 0.5$ “. Für Stationspunkte oberhalb der x-Achse bei $y > 0$ liegt ein positiver und für Stationspunkte unterhalb der x-Achse ein negativer Bias der Modelldaten gegenüber den Messwerten vor. Die Aufteilung der Stationspunkte auf die linke und die rechte Hälfte des Diagramms erfolgt in Abhängigkeit von Korrelationskoeffizient (R) und Standardabweichung (SD) (Janssen & Thunis, 2020).

Das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO gilt, entsprechend der Luftqualitätsrichtlinie 2008/50/EG (EU, 2008), als erfüllt, wenn es für 90 % der Stationen erfüllt ist. In den Assessment Target Plots des DELTA-Tools wird dementsprechend der MQI-Wert in grün dargestellt, wenn das 90. Perzentil der MQI aller Stationen ≤ 1 ist. Dabei werden ein auf stündlichen Werten basierender Wert MQI_{HD} und ein auf Jahresmittelwerten basierender Wert MQI_{YR} berechnet. Der Wert MQI_{HD} stellt den Hauptindikator für die Auswertung dar.

Abbildung 10: Beispiel für einen Assessment Target Plot des DELTA-Tools



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Zusätzlich zu den Assessment Target Plots wurden Forecast Target Plots für die verschiedenen Prognosetage ausgewertet. Der Forecast-Modus des DELTA-Tools vergleicht die betrachteten Prognosedaten mit einem persistenten Modell. Dieses verwendet die Messwerte vom vorangegangenen Tag als Prognose für den betrachteten Vorhersagezeitraum, d. h. es erfolgen in der Prognose keine Änderungen im Konzentrationsniveau. Implementiert ist dieser Ansatz in der verwendeten Version 6.0.1 des DELTA-Tools für NO₂ für den maximalen Ein-Stunden-Mittelwert eines Tages, für O₃ für den maximalen gleitenden Acht-Stunden-Mittelwert eines Tages sowie für PM₁₀ und PM_{2,5} für den Tagesmittelwert. Verwendet wird entsprechend den betrachteten Größen genau ein Wert pro Tag, d. h. es findet keine Auswertung auf stündlicher Basis statt (Janssen & Thunis, 2020; Thunis & Cuvelier, 2020).

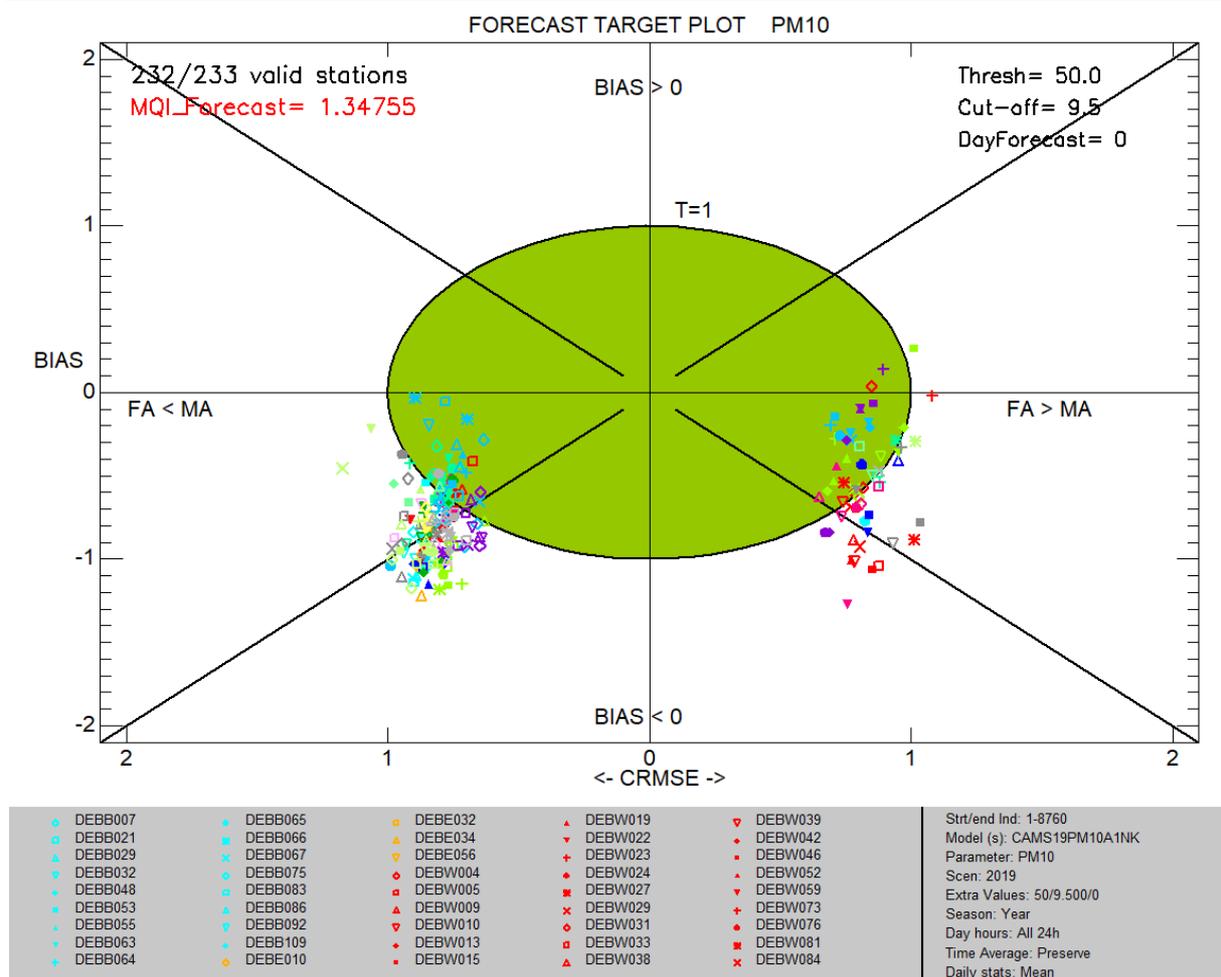
Der MQI wird im Forecast-Modus nicht wie für die Assessment Target Plots in Abhängigkeit von den Messunsicherheiten der einzelnen Schadstoffkomponenten bestimmt, sondern auf eine Größe bezogen, die die „Intra-Day-Variation“ repräsentiert und aus der Differenz zwischen dem persistenten Modell und den Beobachtungen bestimmt wird. Für die mathematische Formulierung dieser Größe wird auf Janssen & Thunis (2020) verwiesen. Die Güte der Vorhersage wird dann wie folgt beurteilt:

- ▶ $MQI_Forecast < 1$. Die betrachteten Modellprognosen sind besser als das persistente Modell.
- ▶ $MQI_Forecast > 1$. Die betrachteten Modellprognosen sind schlechter als das persistente Modell.

Das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO im Forecast-Modus ($MQO_Forecast$) ist erfüllt, wenn $MQI_Forecast \leq 1$. Wichtig für das Verständnis des MQI im Forecast-Modus ist, dass er im Gegensatz zum MQI für die Assessment Target Plots, der sich mit den Messwerten auf eine feste Referenzgröße bezieht, eine vergleichende Aussage zwischen zwei Modellen trifft, in dem er für eine gegebene Vorhersagelänge die Modellprognose mit dem persistenten Modell vergleicht. Hat man beispielsweise ein Modell, dessen Vorhersagegüte mit zunehmender Vorhersagelänge weniger stark abnimmt als die des persistenten Modells, dann führt dies dazu, dass der MQI im Forecast-Modus für das Modell mit steigender Vorhersagelänge kleiner wird, auch wenn die Vorhersagegüte des Modells mit steigender Vorhersagelänge abnimmt (was durch den steigenden MQI in den Assessment Target Plots angezeigt wird).

Die normierte Auswertung der statistischen Parameter wird vom DELTA-Tool im Forecast-Modus analog zum „Assessment Target Plot“ in einem „Forecast Target Plot“ zusammengefasst (Abbildung 11). An Stationspunkten, die innerhalb der grünen Ellipse liegen, ist die Bedingung „ $MQI_Forecast \leq 1$ “ erfüllt. Die Position der Stationspunkte ober- und unterhalb der x-Achse ($y=0$) zeigt analog zum Assessment Target Plot den Bias der Prognosedaten an, und die Aufteilung der Stationspunkte auf die linke und die rechte Hälfte des Target Plots wird bestimmt in Abhängigkeit der fälschlicherweise vorhergesagten Schwellenwertüberschreitungen (False Alarms, FA) und der nicht erfassten Schwellenwertüberschreitungen (Missed Alarms, MA). Die Festlegung, ob eine Schwellenwertüberschreitung gemessen oder modelliert wurde, erfolgt im DELTA-Tool unter Berücksichtigung der Messunsicherheiten der einzelnen Schadstoffkomponenten (Janssen & Thunis, 2020). Der im Forecast Target Plot angegebene $MQI_Forecast$ entspricht analog zum Assessment Target Plot dem 90. Perzentil der $MQI_Forecast$ aller Stationen und wird in grün dargestellt, wenn er ≤ 1 ist.

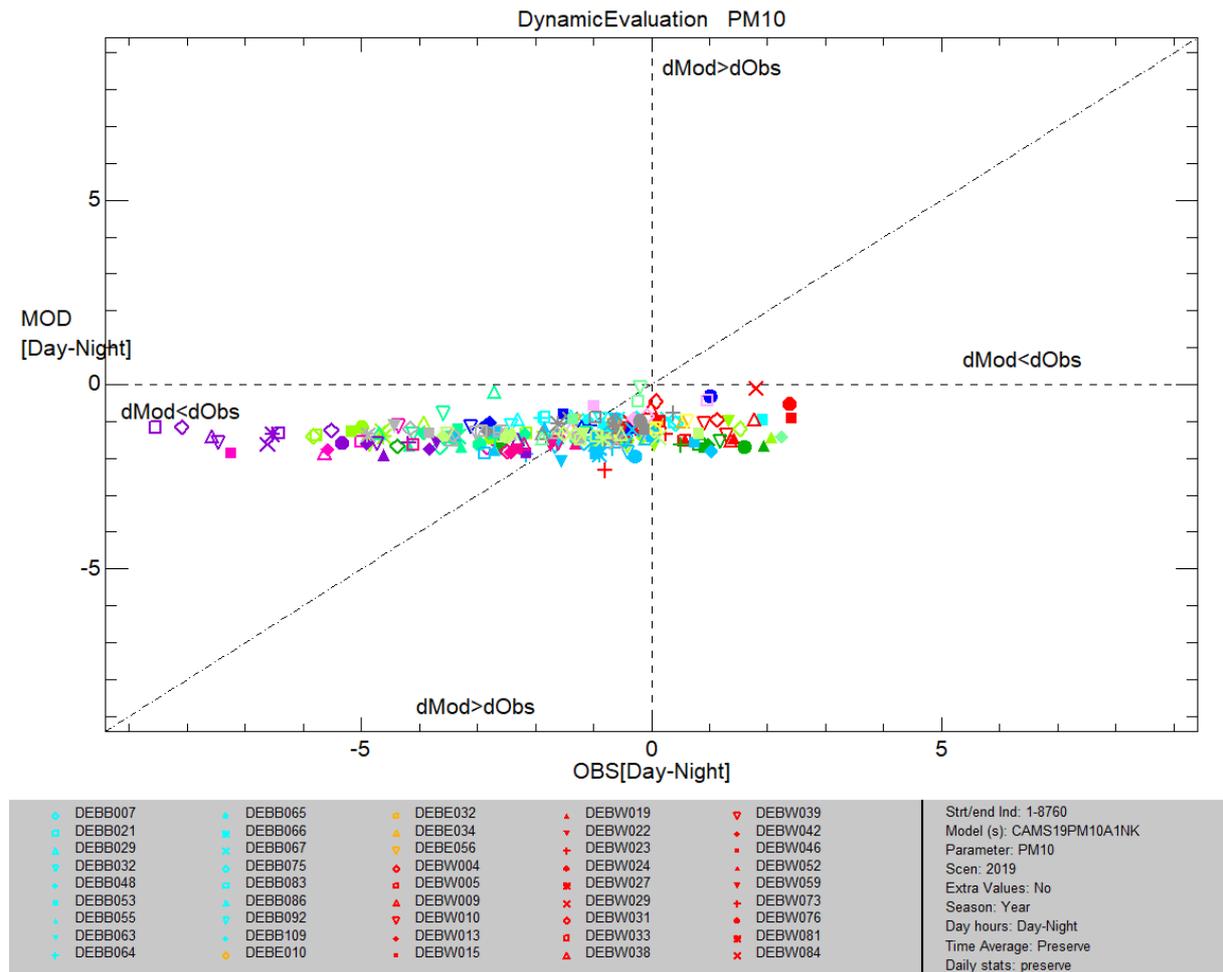
Abbildung 11: Beispiel für einen Forecast Target Plot des DELTA-Tools



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Eine weitere Auswertung, die das DELTA-Tool anbietet und die im vorliegenden Projekt ergänzend genutzt wurde, ist eine Form der dynamischen Evaluierung. Hierzu werden sowohl für die Modellergebnisse an den einzelnen Stationsorten als auch für die Messwerte selbst die mittleren Differenzen zwischen Paaren von Zeitbezügen (Tag – Nacht, Sommer – Winter, Wochentag – Wochenende) gebildet und in einem Scatterplot gegeneinander aufgetragen. Abbildung 12 zeigt beispielhaft die vom DELTA-Tool erzeugte dynamische Evaluierung „Tag – Nacht“ für PM₁₀ im Bezugsjahr 2019 an den betrachteten Area-Stationen. Die Differenzen zwischen den Mittelwerten über Tag und Nacht sind für die Modellergebnisse entlang der y-Achse aufgetragen und für die Messwerte entlang der x-Achse. Im Idealfall sollten alle Stationspunkte entlang der 1:1-Diagonalen liegen (Thunis & Cuvelier, 2020).

Abbildung 12: Beispiel für eine dynamische Evaluierung Tag - Nacht des DELTA-Tools



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

6 Aufbau der Testumgebung

Um die Wirkung der verschiedenen Korrekturverfahren evaluieren zu können, wurde die Testumgebung verwendet, die im Rahmen des Projekts „Sicherstellung der Ozonprognose (IVU Umwelt, 2018) in der Skriptsprache „R“ implementiert wurde. Die Testumgebung wurde dafür im Rahmen dieses Projekts um folgende Punkte erweitert:

- ▶ Berücksichtigung von NO₂, insbesondere auch, was die Evaluierung von Schwellenwertüberschreitungen betrifft,
- ▶ Differenzierung der Evaluierung nach Stationstypen, zum einen nach der Stationsklassifizierung des UBA (Spot/Area) und zum anderen nach EoI (EG, 1997),
- ▶ verkehrsspezifische Erweiterungen der Hybrid-Vorhersage, d. h. Berücksichtigung von Wochengang und einzelnen Feiertagen.

Die Linearen Modelle, die in Abschnitt 4.4 beschrieben werden, wurden ebenfalls in der Skriptsprache „R“ implementiert, aber nicht in der Testumgebung, da es sich um exemplarische Untersuchungen für einzelne Stationsorte handelt. Für eine konsistente Evaluierung der mit den verschiedenen Verfahren erzeugten Prognosen wurde aber die Berechnung der statistischen Kennwerte gemäß Abschnitt 5.1 aus der Testumgebung für die Linearen Modelle übernommen.

Die Beschreibung der Testumgebung wurde im Wesentlichen aus IVU Umwelt (2018) übernommen und wird hier im Folgenden nochmals aufgeführt. Dabei wird sie hinsichtlich der im Rahmen dieses Projektes vorgenommenen Erweiterungen aktualisiert. Abbildung 13 zeigt das Ablaufschema der Testumgebung. Im ersten Schritt werden die zu untersuchenden Daten eingelesen. Dies sind zum einen die Messdaten für den zu untersuchenden Schadstoff zusammen mit den Stationsmetadaten (Abschnitt 3.1) und zum anderen die zugehörigen CAMS-Prognosedaten (Abschnitt 3.2).

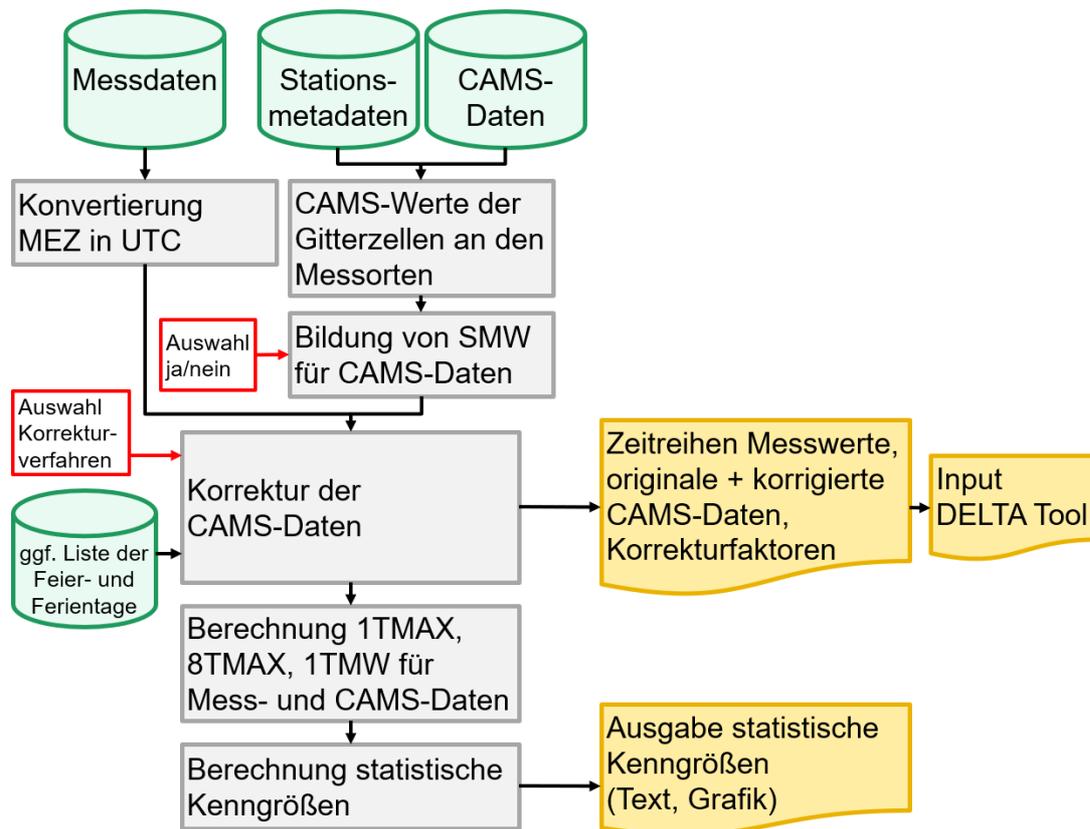
Die Messdaten werden für jede Station zu einer zusammenhängenden Zeitreihe zusammengefügt und von MEZ nach UTC konvertiert, so dass sie mit den CAMS-Prognosedaten verglichen werden können. Fehlwerte (Messwert -999) werden als solche abgelegt (Wert NA). Dadurch ist sichergestellt, dass alle weiteren Berechnungen, die Fehlwerte enthalten, im Ergebnis auch Fehlwerte liefern.

Die CAMS-Prognosedaten liegen als NetCDF-Dateien vor. Mit Hilfe der Positionsdaten der Messstationen liest die Testumgebung die CAMS-Prognosewerte an den Messorten aus den NetCDF-Eingangdateien aus. Dabei wird pro Station der Konzentrationswert derjenigen Gitterzelle des CAMS-Modells verwendet, in der die Messstation verortet ist; eine Interpolation auf den Messort innerhalb der Gitterzelle wird nicht vorgenommen.

Wie in Abschnitt 3.1 und Abschnitt 3.2 erläutert, liegen die Messdaten als Stundenmittelwerte (SMW) und die CAMS-Prognosedaten als Momentanwerte zu jeder Stunde vor. In der Testumgebung kann gewählt werden, ob die weiteren Auswertungen auf Basis der Momentanwerte der CAMS-Daten durchgeführt werden sollen, oder ob zunächst aus den Momentanwerten Stundenmittel gebildet werden sollen, indem aus dem Momentanwerten jeweils zu Anfang und zu Ende einer Stunde der Mittelwert bestimmt wird. In IVU Umwelt (2018) wurde untersucht, welchen Einfluss die Verwendung stundengemittelter CAMS-Prognosedaten auf die statistische Auswertung hat. Es wurde gezeigt, dass die betrachteten statistischen Metriken für die stundengemittelten und die Momentanwerte sich nur marginal unterscheiden. Da die Verwendung stundengemittelter CAMS-Daten den Stundenmittelwerten der Messdaten

inhaltlich näherkommt, wird diese Vorgehensweise für die Anwendung der Testumgebung empfohlen.

Abbildung 13: Ablaufschema Testumgebung



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Im zweiten Schritt wird für jede Stunde an jedem Messort mit dem in der Testumgebung ausgewählten Korrekturverfahren ein Korrekturwert bestimmt, mit dem die CAMS-Prognose für den jeweiligen Messort korrigiert wird. Der Korrektur liegen die CAMS-Prognosewerte der jeweils vorangegangenen Tage an den Messorten, die zugehörigen Messwerte sowie ggf. Informationen zu den Feier- und Ferientagen der Bundesländer zugrunde.

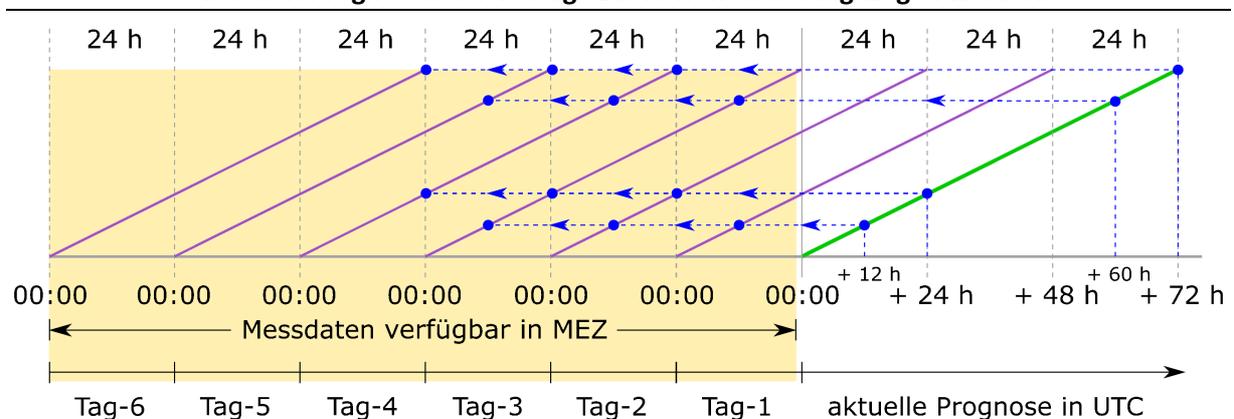
In der Testumgebung sind analog zum operationellen Online-Tool Ozonprognose (IVU Umwelt, 2018) zwei Korrekturverfahren implementiert, zum einen die in IVU Umwelt (2018) als Korrekturverfahren empfohlene und seitdem im Online-Tool für die Ozonprognose standardmäßig angewendete Hybrid-Vorhersage (Abschnitt 4.1) und zum anderen die Multiplikative Korrektur (IVU Umwelt, 2018). Zudem wurden im Rahmen dieses Projektes die beiden in Abschnitt 4.2 und Abschnitt 4.3 beschriebenen Erweiterungen für die Hybrid-Vorhersage implementiert:

- ▶ Hybrid-Vorhersage (Abschnitt 4.1)
 - Erweiterung Hybrid-Vorhersage: Wochentagskorrektur (Abschnitt 4.2)
 - Erweiterung Hybrid-Vorhersage: Feiertagskorrektur (Abschnitt 4.3)
- ▶ Multiplikative Korrektur (IVU Umwelt, 2018)

Die beiden Erweiterungen zur Hybrid-Vorhersage können einzeln oder in Kombination miteinander auf die Hybrid-Vorhersage angewendet werden. Alternativ können die Original-Modelldaten auch ohne Korrektur evaluiert werden. Die Anzahl der zur Korrektur herangezogenen vorangegangenen Tage kann, unabhängig vom Korrekturverfahren, ebenfalls in der Testumgebung festgelegt werden. Abbildung 14 zeigt beispielhaft die erforderlichen CAMS-Prognosen der Vortage (violett) für die Korrektur der aktuellen CAMS-Prognose (grün) bei einem Vorlauf des Korrekturverfahrens von 3 Tagen. Wesentlich ist dabei, dass für jeden zur Korrektur herangezogenen Modellwert ein entsprechender Messwert zur Verfügung steht. Daher sind für die Korrektur aktueller Prognosestunden $\geq +24$ h CAMS-Prognosen erforderlich, die länger als drei Tage zurück liegen. Es wird darauf hingewiesen, dass aufgrund der Umwandlung der Messwerte von MEZ nach UTC für die letzte Stunde vom Vortag (23:00 Uhr bis 24:00 Uhr) kein Messwert vorliegt, so dass hier bereits die Werte aus der einen Tag weiter zurückliegenden Prognose verwendet werden müssen (siehe Abbildung 14, Beispiel „+ 24 h“ oder „+ 72 h“). Fehlt einer der benötigten Werte, so wird im Ergebnis ebenfalls ein Fehlwert erzeugt.

Die CAMS-Prognosedaten liegen aus dem europäischen Copernicus-Programm täglich als Zeitreihen über die jeweils nächsten 96 Stunden ab Starttermin der Prognose vor. Im Rahmen der Testumgebung können davon entsprechend dem Vorgehen in IVU Umwelt (2018) jeweils die ersten 72 Stunden betrachtet werden. Um für die Testumgebung durchgehende Zeitreihen der CAMS-Prognosen zu erhalten, werden diese in Abhängigkeit vom Prognostag gebildet. Beispielsweise werden für den Prognostag 1 die Zeitreihen durch Aneinanderreihung der täglichen Prognosestunden + 01 h bis + 24 h ab Initialisierung gebildet, für den Prognostag 2 durch die Aneinanderreihung der täglichen Prognosestunden + 25 h bis + 48 h etc. Auf diese Weise erhält man durchgehende Zeitreihen der CAMS-Prognosen, die eine bestimmte Vorhersagelänge repräsentieren. Führt man die Evaluierung gemäß Abschnitt 5.1 nacheinander für alle 3 Prognostage durch und vergleicht man deren Ergebnisse untereinander, so kann damit die Änderung der Vorhersagegüte mit der Vorhersagelänge bewertet werden.

Abbildung 14: Erforderliche CAMS-Prognosen der Vortage (violett) für die Korrektur der aktuellen CAMS-Prognose über die nächsten 72 h (grün) bei einem Vorlauf des Korrekturverfahrens von 3 Tagen. Der Zeitraum, in dem Messdaten verfügbar sind, ist orange hinterlegt. Die blauen Markierungen geben beispielhaft für die aktuellen Prognosestunden + 12 h, + 24 h, + 60 h und + 72 h an, welche Stundenwerte aus welchen Prognosen der Vortage zur Korrektur herangezogen werden.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Nach der Korrektur der CAMS-Daten werden für die Mess- und die korrigierten CAMS-Zeitreihen für die Schadstoffe Ozon und PM_{10} weitere nach 2008/50/EG relevante Bewertungsgrößen ermittelt. Für Ozon handelt es sich dabei um den höchsten Ein-Stunden-Mittelwert pro Tag

(1TMAX) und den höchsten Acht-Stunden-Mittelwert pro Tag aus stündlich gleitenden Acht-Stunden-Mittelwerten (8TMAX). Zur Bestimmung des 1TMAX müssen dabei mindestens 18 gültige Ein-Stunden-Mittelwerte eines Tages vorliegen. Entsprechend werden gleitende Acht-Stunden-Mittelwerte nur bestimmt, wenn in dem jeweiligen Acht-Stunden-Zeitraum mindestens 6 gültige Ein-Stunden-Mittelwerte vorliegen, und 8TMAX werden nur bestimmt, wenn mindestens 18 gültige Acht-Stunden-Mittelwerte eines Tages vorliegen. Andernfalls wird der entsprechende 1TMAX bzw. 8TMAX mit einem Fehlwert belegt. Für PM_{10} wird tagesweise der Tagesmittelwert (1TMW) bestimmt, sofern mindestens 18 gültige Ein-Stunden-Mittelwerte für den jeweiligen Tag vorliegen, andernfalls wird der entsprechende 1TMW mit einem Fehlwert belegt.

Abschließend werden für die Stundenmittelwerte und die abgeleiteten Bewertungsgrößen 1TMAX und 8TMAX bzw. 1TMW die in Abschnitt 5.1 aufgeführten Metriken bestimmt.

Die Testumgebung erzeugt folgende Ausgaben:

- ▶ Tabellen im ASCII-Format mit den stündlichen Zeitreihen der Messwerte, der originalen und der korrigierten CAMS-Daten und der Korrekturwerte für alle Stationen
- ▶ Tabellen im ASCII-Format mit den Zeitreihen der abgeleiteten Bewertungsgrößen für die Messwerte und die korrigierten CAMS-Daten für alle Stationen
- ▶ Tabellen im ASCII-Format mit den nach Abschnitt 5.1 berechneten Metriken für Stundenmittelwerte und abgeleitete Bewertungsgrößen für alle Stationen
- ▶ Zeitreihenplots und Scatterplots pro Station mit den Mess- und den korrigierten Modelldaten, für die Stundenmittelwerte und für die abgeleiteten Bewertungsgrößen
- ▶ Box-Whisker-Plots für die einzelnen Metriken aus Abschnitt 5.1, die die Ergebnisse über alle Stationen zusammenfassen, für die Stundenmittelwerte und für die abgeleiteten Bewertungsgrößen
- ▶ Soccer-Plots (Abschnitt 5.1) für die Stundenmittelwerte und für die abgeleiteten Bewertungsgrößen

Zur Erzeugung der Daten, die als Input zur Auswertung der Performance von Modell und Korrekturverfahren im DELTA-Tool (Abschnitt 5.2) erforderlich sind, wird ein der Testumgebung nachgeschaltetes R-Skript eingesetzt.

7 Evaluierung der Hybrid-Vorhersage

7.1 PM₁₀: Area-Stationen, Bezugsjahr 2019

In Tabelle 6 sind die mit der Testumgebung berechneten statistischen Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen für PM₁₀-Stundenmittelwerte für alle drei Prognosetage aufgeführt, jeweils als Median über alle entsprechenden statistischen Kennwerte an den berücksichtigten Area-Stationen.

Die Werte zeigen, dass der PM₁₀-Mittelwert von den unkorrigierten CAMS-Prognosen im Median unterschätzt wird, ebenso die Standardabweichung. Die Maximalwerte werden von den CAMS-Prognosen deutlich unterschätzt, hier wird nur ca. ein Drittel der gemessenen Konzentrationen prognostiziert. Die Korrelation liegt bei ca. 0.6. Die Medianwerte sind über die drei Prognosetage relativ konstant, nur Korrelation, RMSE, MFB und FGE werden mit den Prognosetagen minimal schlechter.

Durch die Hybrid-Vorhersage wird eine effektive Biaskorrektur vorgenommen. Mittelwerte und Standardabweichungen der korrigierten CAMS-Prognosen entsprechen im Median weitgehend denen der Messwerte, und auch die Maximalwerte werden besser erfasst. Sowohl der BIAS als auch der MFB liegen deutlich niedriger als bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen. Der Korrelationskoeffizient ist hingegen im Median für die korrigierten CAMS-Prognosen niedriger und der FGE höher als für die unkorrigierten CAMS-Prognosen. Bei den korrigierten Prognosen ist zudem zu beobachten, dass der Korrelationskoeffizient über die Prognosetage im Median stärker abnimmt und RMSE und FGE stärker zunehmen als bei den unkorrigierten Prognosen.

Tabelle 6: PM₁₀-Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Area-Stationen, 2019

Metrik	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS
	PT1	PT2	PT3	HV PT1	HV PT2	HV PT3
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.83	0.86	0.86	0.00	0.00	0.00
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	14.91	14.89	14.91	14.90	14.93	14.96
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	10.19	10.06	10.06	14.93	14.94	14.94
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	138.03	123.43	123.43	123.43	123.43	123.43
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	44.66	45.46	43.50	132.79	117.24	113.70
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	10.63	10.58	10.59	10.59	10.61	10.62
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	5.53	5.51	5.48	10.56	10.30	10.29
Korrelation [-]	0.63	0.62	0.59	0.58	0.49	0.43
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	9.53	9.57	9.72	9.58	10.33	10.97
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-4.53	-4.54	-4.52	0.03	0.04	0.03
MFB [%]	-24.10	-25.28	-25.52	-2.97	-2.66	-2.98
FGE [%]	46.93	48.11	48.94	48.78	53.14	56.71

Tabelle 7 zeigt die entsprechenden Medianwerte für die PM₁₀-Tagesmittelwerte. Für die unkorrigierten CAMS-Prognosen entsprechen die Tendenzen denjenigen, die auch bei den Stundenmittelwerten beschrieben wurden. Allerdings ist der Korrelationskoeffizient mit Werten zwischen 0.76 (1. Prognosetag) und 0.71 (3. Prognosetag) deutlich höher als für die PM₁₀-Stundenmittelwerte. Hit Rate und FAR werden aufgrund der niedrigen Anzahl gemessener Überschreitungen des betrachteten Schwellenwerts von 50 µg/m³ an dieser Stelle nicht bewertet.

Die effektive Biaskorrektur der Hybrid-Vorhersage spiegelt sich auch in den Tagesmittelwerten wider. Mittelwerte, Maximalwerte und Standardabweichung der Beobachtungen werden im Median gut durch die korrigierten CAMS-Prognosen erfasst, BIAS und MFB sind sehr niedrig. Wie bei den Stundenmittelwerten nimmt der Korrelationskoeffizient über die Prognosetage stärker ab und RMSE und FGE nehmen stärker zu als bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen. Im Unterschied zu den Stundenmittelwerten sind aber RMSE und FGE im Median über alle Prognosetage durchweg niedriger als bei den unkorrigierten Prognosen. Der Korrelationskoeffizient ist mit 0.79 am 1. Prognosetag etwas höher, sonst niedriger als bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen.

Tabelle 7: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Area-Stationen, 2019

Metrik	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS
	PT1	PT2	PT3	HV PT1	HV PT2	HV PT3
Min Obs [µg/m ³]	2.11	2.11	2.11	2.18	2.21	2.27
Min Mod [µg/m ³]	2.40	2.41	2.57	1.82	1.38	0.96
Mean Obs [µg/m ³]	14.92	14.89	14.90	14.91	14.95	14.98
Mean Mod [µg/m ³]	10.16	10.06	10.05	14.94	14.92	14.91
Max Obs [µg/m ³]	55.48	55.48	55.48	55.47	55.45	55.47
Max Mod [µg/m ³]	30.05	30.66	31.07	54.38	53.20	51.91
SD Obs [µg/m ³]	8.33	8.33	8.34	8.31	8.28	8.29
SD Mod [µg/m ³]	4.68	4.67	4.73	8.13	7.86	7.85
Korrelation [-]	0.76	0.74	0.71	0.79	0.66	0.58
RMSE [µg/m ³]	7.18	7.29	7.50	5.26	6.68	7.32
BIAS [µg/m ³]	-4.52	-4.54	-4.50	0.03	0.04	0.03
MFB [%]	-29.09	-29.86	-30.44	0.65	1.00	1.08
FGE [%]	37.50	38.84	39.95	26.45	33.29	36.80
MeasExc (50 µg/m ³) ¹ [-]	1	1	1	1	1	1
Hit Rate (50 µg/m ³) ¹ [%]	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
FAR (50 µg/m ³) ¹ [%]	0.00	0.00	0.00	0.28	0.28	0.28

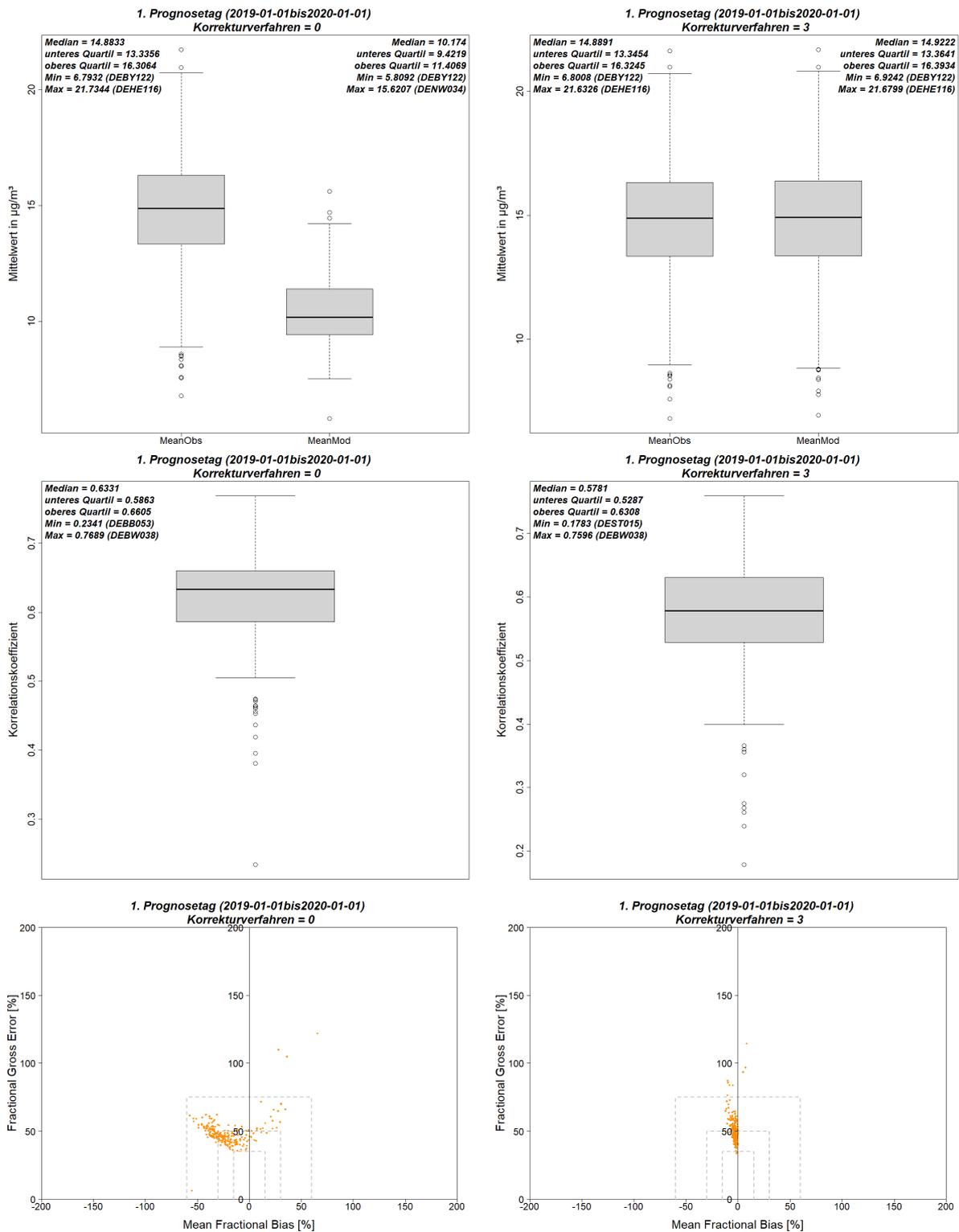
¹: Schwellenwert 50 µg/m³

In Abbildung 15 sind die Box-Whisker-Plots für Mittelwerte und Korrelationskoeffizienten sowie die Soccer-Plots zusammengestellt, links für die unkorrigierten und rechts für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten PM₁₀-Prognosen der Stundenmittelwerte, jeweils für den ersten Prognosetag.

Die Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (Abbildung 15, oben) zeigen die effektive Biaskorrektur der prognostizierten PM₁₀-Stundenmittelwerte durch die Hybrid-Vorhersage, die nicht nur im Median zum Tragen kommt, sondern über die gesamte Spannweite des betrachteten Stationskollektivs. In den Box-Whisker-Plots der Korrelationskoeffizienten (Abbildung 15, Mitte) ist zu erkennen, dass der Korrelationskoeffizient bezüglich der Stundenmittelwerte für das gesamte Stationskollektiv durch die Hybrid-Vorhersage abnimmt, wobei die Abnahme in den Maximalwerten (Maximum und oberes Quartil) geringer ist als im Median und darunter.

Im Soccer-Plot für die unkorrigierten CAMS-Prognosen zeigen die meisten Messorte einen negativen MFB, eine geringere Anzahl Messorte weist auch einen positiven MFB auf (Abbildung 15, unten links). Die nur schwach lineare Gruppierung der Stationspunkte deutet darauf hin, dass bei den PM₁₀-Stundenmittelwerten eher zufällige Fehler in den CAMS-Prognosedaten dominieren. Durch die Korrektur mit der Hybrid-Vorhersage gruppieren sich die Stationspunkte eng um die y-Achse, d. h. der MFB geht an allen Stationen deutlich zurück, wobei der Schwerpunkt der Stationspunkte weiterhin im negativen Bereich des MFB liegt. Der Wertebereich des FGE wird durch die Hybrid-Vorhersage nur wenig reduziert, der Median liegt, wie in Tabelle 6 beschrieben, sogar geringfügig höher als bei den unkorrigierten Prognosen.

Abbildung 15: PM₁₀-Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (oben) und Korrelationskoeffizienten (Mitte) an den Stationsorten sowie Soccer Plots (unten) über alle Area-Stationen, 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



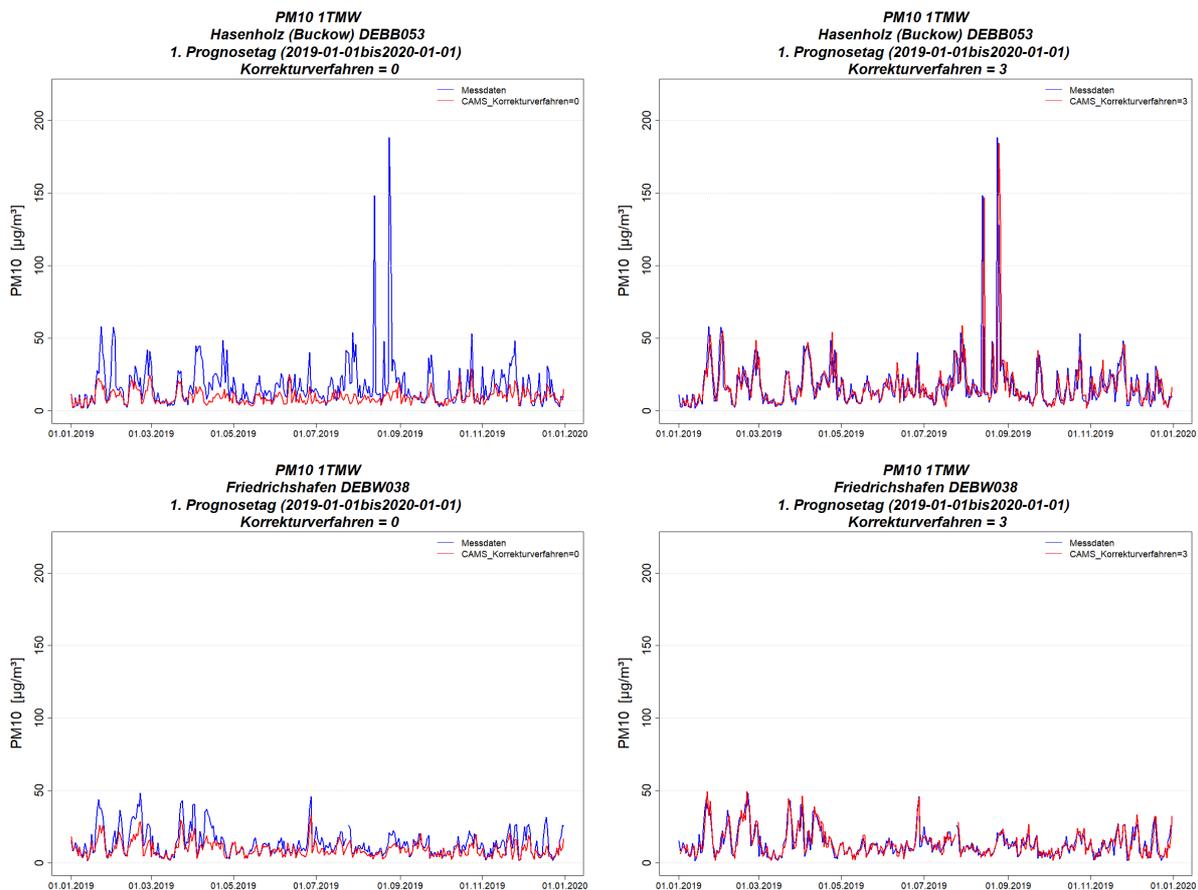
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 16 sind beispielhaft die Zeitreihen der PM₁₀-Tagesmittelwerte 2019 für die Station mit dem niedrigsten (oben, Station DEBB053 Hasenholz) und mit dem höchsten (unten, Station

DEBW038 Friedrichshafen) Korrelationskoeffizienten für die unkorrigierten CAMS-Prognosen abgebildet. Links sind dabei die Zeitreihen der unkorrigierten und rechts die Zeitreihen der korrigierten CAMS-Prognosen dargestellt.

Es ist gut zu sehen, dass die unkorrigierten Prognosen die Messwerte im Regelfall unterschätzen, wie auch schon aus den bisherigen statistischen Auswertungen hervorging, und dass insbesondere Episoden mit hohen PM₁₀-Tagesmittelwerten wie im Juli und August in Hasenholz von den CAMS-Prognosen nicht erfasst werden. Letztes ist ggf. auch gar nicht möglich, wenn solche Episoden auf lokale Emissionsereignisse zurückgehen, die von dem Emissionskataster, dass den CAMS-Prognosen zu Grunde liegt, gar nicht erfasst werden. Im Gegensatz dazu wurden die Episoden, die im ersten Quartal 2019 sowohl in Hasenholz als auch in Friedrichshafen auftraten, durch die CAMS-Prognosen zumindest im Ansatz erfasst, wenn auch die Maximalwerte nicht korrekt prognostiziert wurden.

Abbildung 16: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



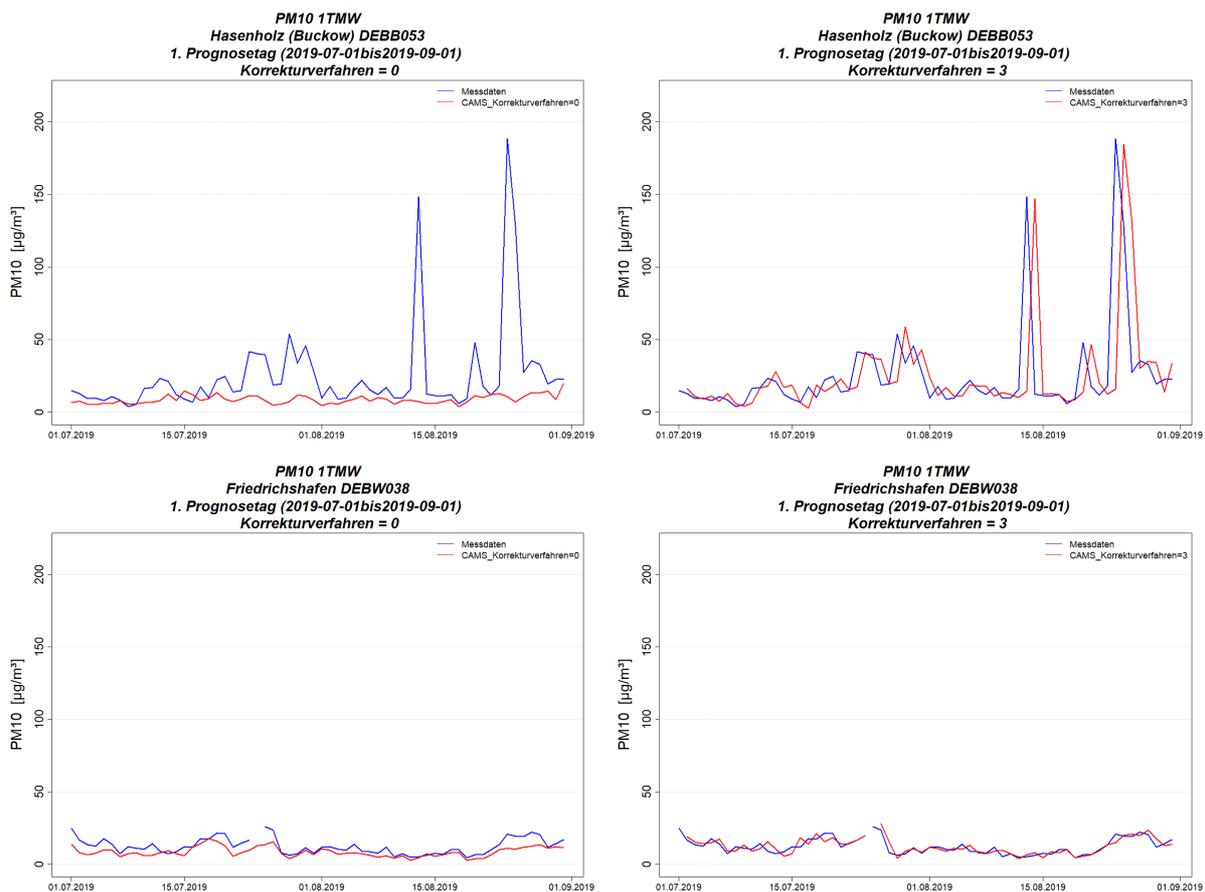
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Die Korrektur der CAMS-Prognosen durch die Hybrid-Vorhersage führt zu einer deutlich besseren Erfassung der Zeitreihe und ihrer Maximalwerte (Abbildung 16, rechts). Eine genauere Betrachtung der Monate Juli und August 2019 (Abbildung 17) zeigt aber, dass dadurch, dass bei der verwendeten Form der Hybrid-Vorhersage die Prognosewerte mit der Differenz zwischen Messung und Modell vom Vortrag korrigiert werden, ein zeitlicher Verzug von einem Tag

auftritt, mit dem die Episoden erfasst werden. Trotzdem erhöht sich der Korrelationskoeffizient für Tagesmittelwerte für die Station Hasenholz durch die Korrektur von 0.43 auf 0.5.

Für Stationen mit einem gleichmäßigeren Konzentrationsverlauf und längeren Episoden, wie hier beispielhaft Friedrichshafen, ist der zeitliche Verzug weniger relevant. Der zeitliche Konzentrationsverlauf wird bereits durch die unkorrigierten CAMS-Prognosen in Teilen recht gut beschrieben und erfährt durch die Korrektur eine Verbesserung insbesondere in den Maximalwerten. Der Korrelationskoeffizient für Tagesmittelwerte erhöht sich durch die Korrektur von 0.87 auf 0.89.

Abbildung 17: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognostag, Zeitraum Juli und August 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.

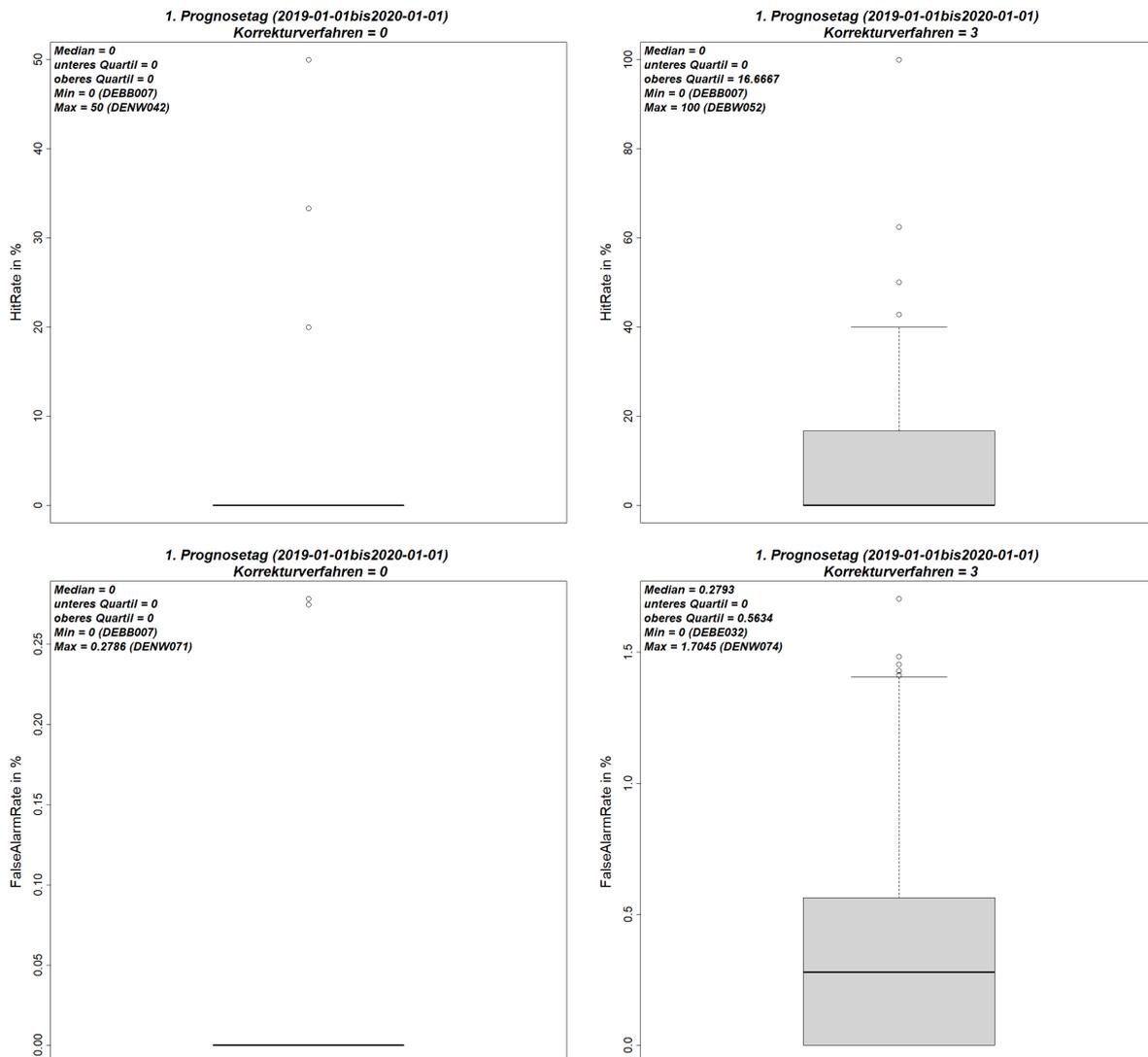


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Die Betrachtung der statistischen Kennwerte zu den Schwellenwertüberschreitungen, d. h. Hit Rate und FAR, ist für PM₁₀-Tagesmittelwerte an Area-Stationen nicht sehr aussagekräftig, da nur wenige Schellenwertüberschreitungen beobachtet werden. Im Median wurde im Jahr 2019 eine Überschreitung des Schwellenwertes von 50 µg/m³ beobachtet, im Maximum traten 12 Überschreitungen auf (an der Station DENW074 Niederzier). Abbildung 18 zeigt die Box-Whisker-Plots der Hit Rate und der FAR für die PM₁₀-Tagesmittelwerte, jeweils für den ersten Prognostag. Die unkorrigierten CAMS-Prognosen erfassen nur an wenigen Stationen überhaupt eine Überschreitung, die maximale Hit Rate liegt bei 50 %. Entsprechendes gilt für die FAR, der Maximalwert liegt hier bei 0.28 %. Durch die Korrektur erhöhen sich Hit Rate und FAR. Auch wenn der Median für die Hit Rate immer noch bei 0 % liegt, liegt das obere Quartil bei 16.7 %

und das Maximum bei 100%, wobei sich diese 100 % auf genau eine Überschreitung des Schwellenwertes an der Station DEBW052 Konstanz beziehen, die korrekt erfasst wird. Für die FAR ergibt sich ein Median von 0.28 % und ein Maximalwert von 1.7 %.

Abbildung 18: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Hit Rate (oben) und der False Alarm Rate (unten) an den Stationsorten über alle Area-Stationen bei einem Schwellenwert von 50 µg/m³. 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

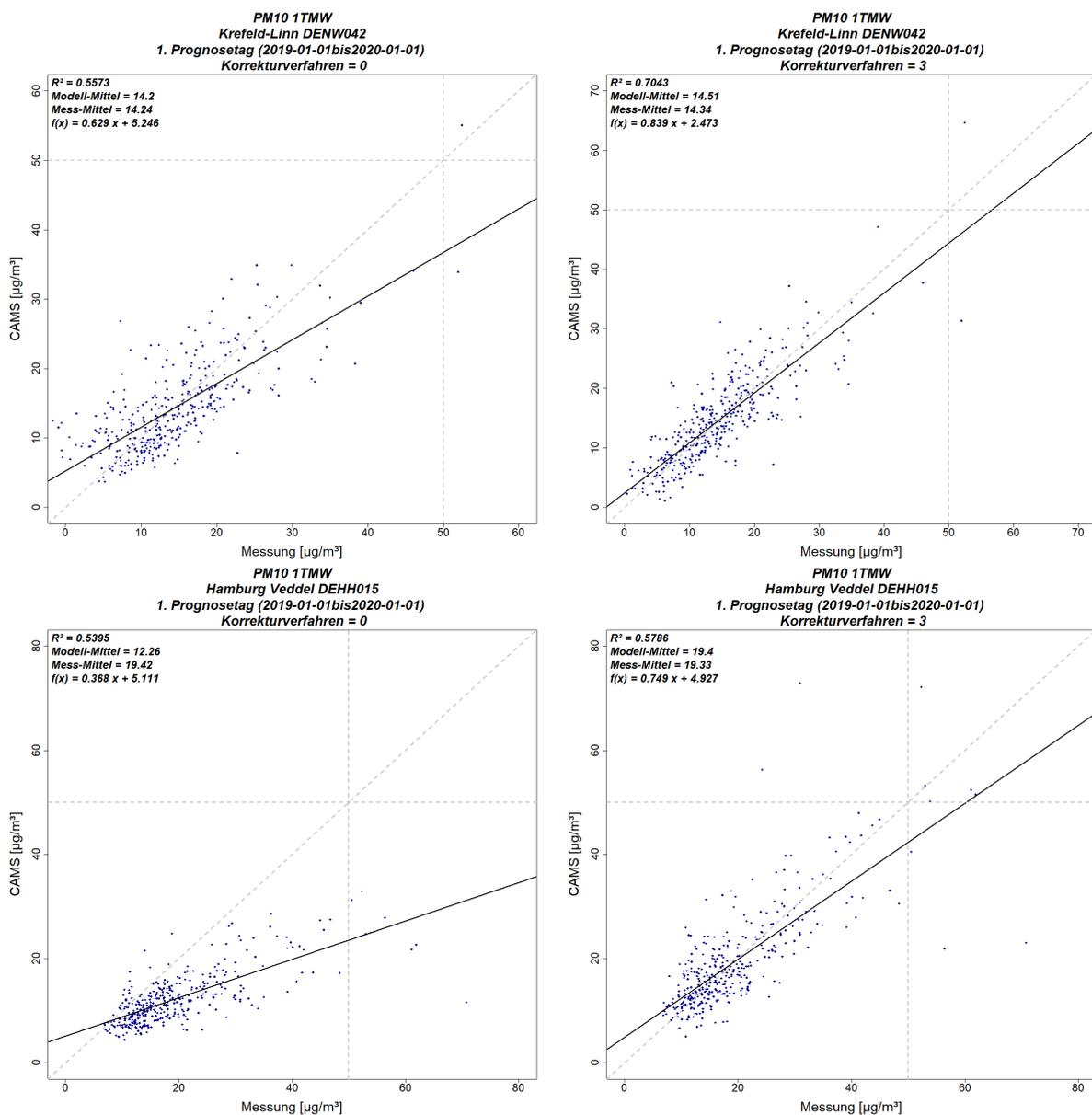
In Abbildung 19 sind beispielhaft die Scatterplots der PM₁₀-Tagesmittelwerte für zwei Stationen dargestellt, von denen die eine die maximale Hit Rate von 50 % bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen aufweist (DENW042 Krefeld-Linn, oben) und die andere eine hohe Hit Rate von 62.5 % bei den korrigierten CAMS-Prognosen (DEHH015 Hamburg Veddel, unten) bei gleichzeitiger, für das betrachtete Stationskollektiv „hoher“ Anzahl von Schwellenwertüberschreitungen, d. h. in diesem Fall von 8 Schwellenwertüberschreitungen.

Für die Station Krefeld-Linn ändert sich durch die Anwendung der Hybrid-Vorhersage bezüglich Hit Rate und FAR nichts, d. h. es wird auch nach der Korrektur nur eine der beiden beobachteten Schwellenwertüberschreitungen erfasst, aber es werden auch keine Schwellenwertüberschrei-

tungen fälschlicherweise vorhergesagt. Der Mittelwert der Messdaten wird bereits durch das unkorrigierte Modell gut getroffen, allerdings verbessert sich das Bestimmtheitsmaß für diese Station durch die Korrektur von 0.56 auf 0.7.

Für die Station Hamburg Veddel steigt die Hit Rate durch die Anwendung der Hybrid-Vorhersage von 0 % auf 62.5 % und die FAR von 0% auf knapp 0.6 % an, d. h. durch die Korrektur wurden fünf der acht beobachteten Schwellenwertüberschreitungen korrekt prognostiziert, und zwei Überschreitungen wurden fälschlicherweise vorhergesagt. Durch die Korrektur wurde zudem der Mittelwert der Prognosedaten auf den Mittelwert der Messdaten angehoben, und das Bestimmtheitsmaß verbessert sich von 0.54 auf 0.58.

Abbildung 19: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Scatterplots mit hohen Werten für die Hit Rate in den unkorrigierten (oben) bzw. in den korrigierten CAMS-Prognosen (unten). 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

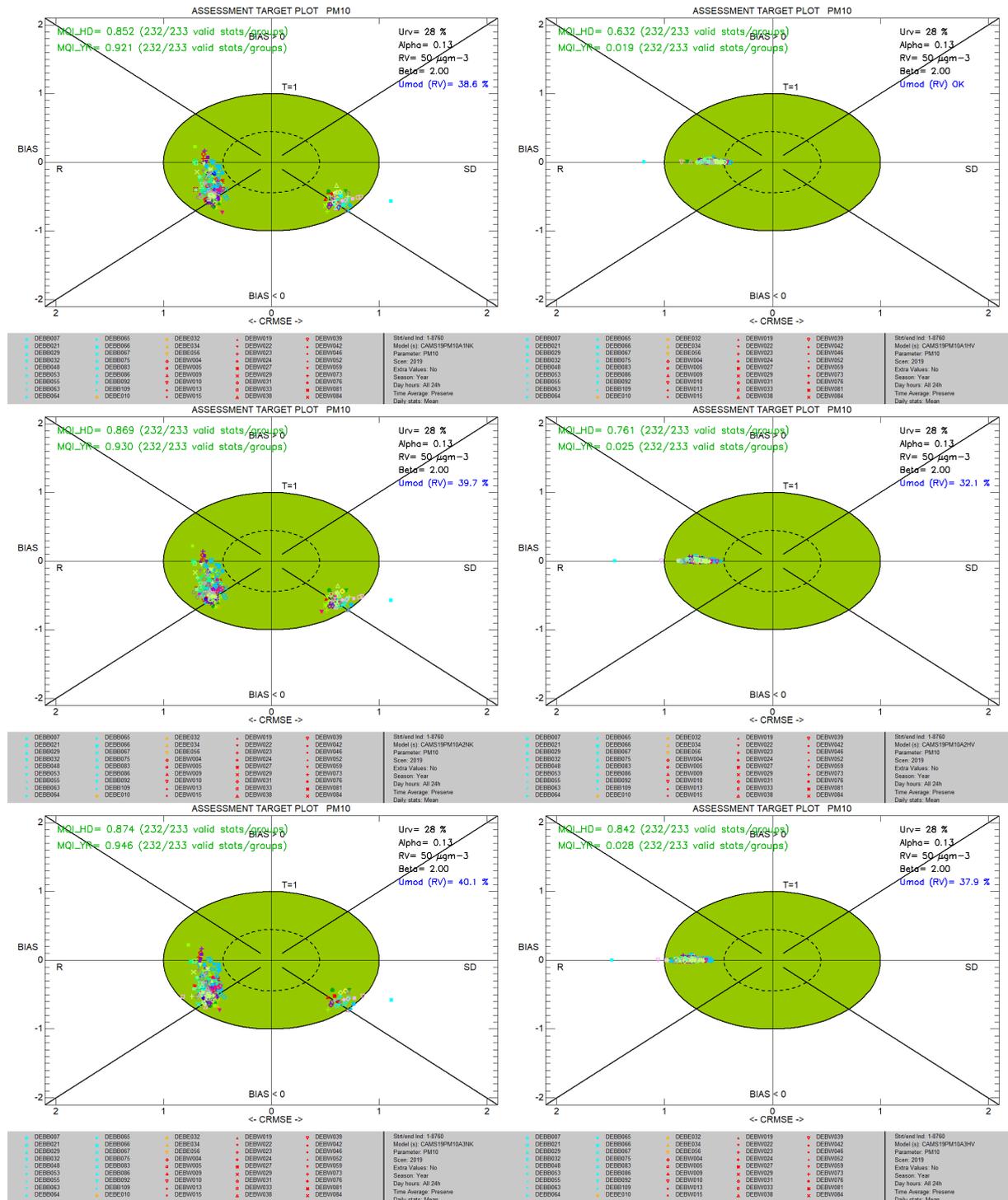
Abbildung 20 zeigt die mit dem FAIRMODE-DELTA-Tool erzeugten Assessment Target Plots für die PM₁₀-Area-Stationen für alle drei Prognosetage, wie bereits bisher links für die unkorrigierten und rechts für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen. Ausgewertet wurden für PM₁₀ die Tagesmittelwerte.

Bereits für die unkorrigierten CAMS-Prognosen wird das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO für alle drei Prognosetage erfüllt. Sowohl der stundenbezogene Hauptindikator MQI_{HD} als auch der auf das Jahr bezogene MQI_{YR} sind für alle drei Prognosetage kleiner als 1, wobei die Werte von Prognosetag 1 nach Prognosetag 3 geringfügig ansteigen. Die Stationspunkte befinden sich bis auf wenige Ausnahmen innerhalb der grünen Ellipse. Dabei teilen sich die Stationspunkte in zwei Cluster auf. Für den größeren Teil der Stationen wird der Modellfehler durch den Korrelationskoeffizienten dominiert (R, linke Hälfte des Target Plots) und für den kleineren Teil durch die Standardabweichung (SD, rechte Hälfte des Target Plots).

Die Korrektur durch die Hybrid-Vorhersage reduziert den MQI_{YR} drastisch von 0.921 auf 0.019 am 1. Prognosetag, der MQI_{YR} steigt auch bis zum 3. Prognosetag nur geringfügig auf 0.028 an. Der MQI_{HD} ist nach der Korrektur am 1. Prognosetag mit 0.632 ebenfalls deutlich niedriger als für die unkorrigierten Prognosen, für die ein MQI_{HD} von 0.852 berechnet wurde. Der MQI_{HD} steigt für die korrigierten Prognosen über die Prognosetage an, ist aber am 3. Prognosetag mit 0.842 immer noch niedriger als für die unkorrigierten Prognosen am 1. Prognosetag. Der bereits bei der Auswertung der statistischen Kennwerte beschriebene geringe Bias der korrigierten Prognosen zeigt sich in den Assessment Target Plots darin, dass die Stationspunkte alle sehr dicht an der x-Achse liegen. Im Unterschied zu den unkorrigierten Prognosen wird der Modellfehler nun an allen Stationen durch den Korrelationskoeffizienten (R) dominiert. Es wird davon ausgegangen, dass der Grund dafür in dem zeitlichen Verzug der korrigierten Zeitreihen liegt, der oben insbesondere für kurze Episoden mit hohen Konzentrationswerten beschrieben wurde. Da der zeitliche Verzug mit dem Prognosetag ansteigt, müsste sich auch der dadurch verursachte Modellfehler erhöhen. Tatsächlich nimmt, wie aus Tabelle 6 und Tabelle 7 ersichtlich, der Korrelationskoeffizient im Median mit dem Prognosetag ab, und in den Assessment Target Plots verschieben sich die Stationspunkte mit dem Prognosetag entlang der x-Achse immer weiter vom Ursprung fort.

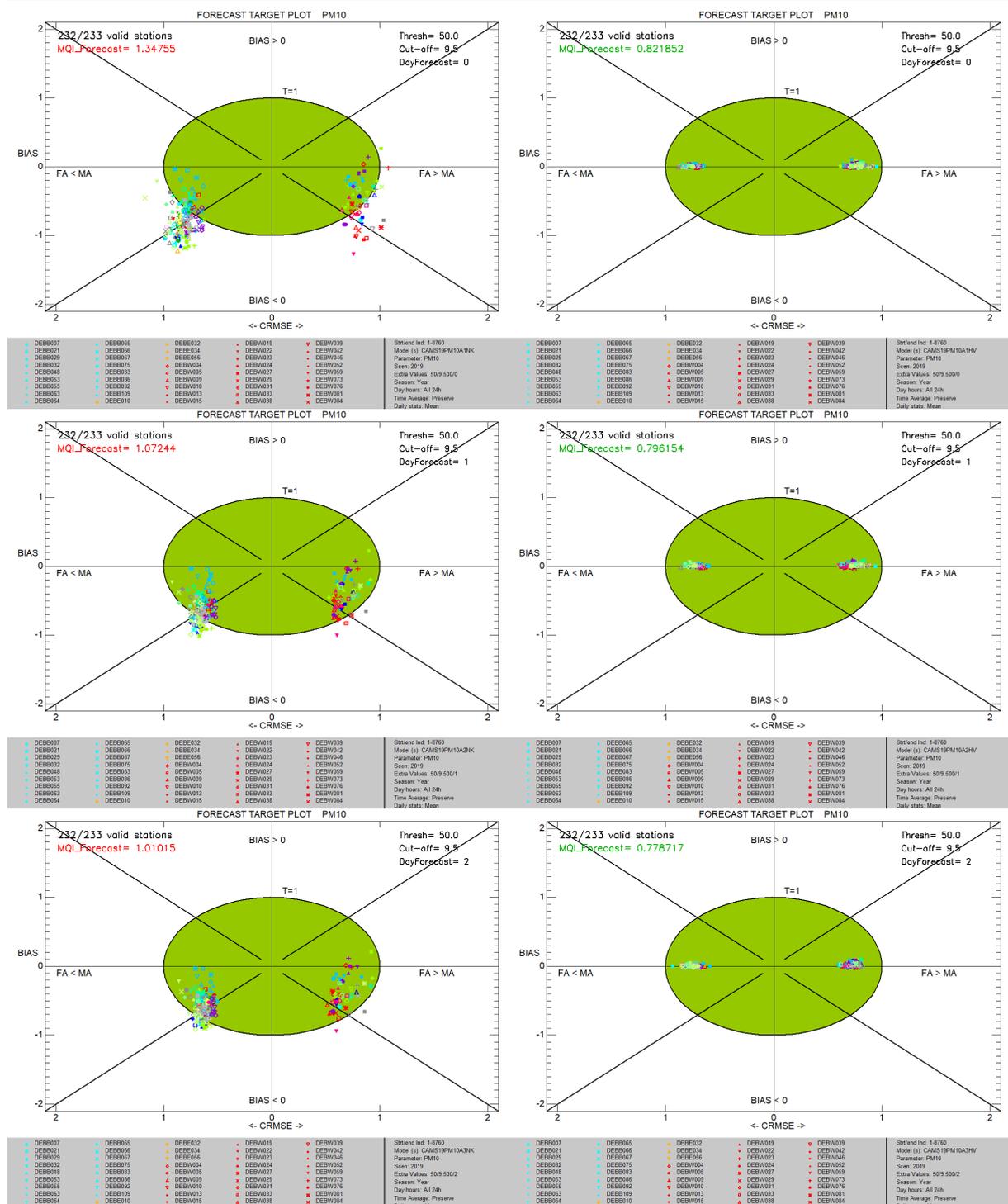
Im Forecast-Modus erfüllen die unkorrigierten CAMS-Prognosen das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO_{Forecast} an keinem der drei Prognose-Tage (Abbildung 21, links). Insbesondere am 1. Prognosetag liegen viele Stationspunkte außerhalb der grünen Ellipse, d. h. sie erfüllen das Kriterium $MQI_{Forecast} \leq 1$ nicht. Entsprechend liegt auch das angegebene 90. Perzentil der MQI_{Forecast} aller Stationen mit 1.348 deutlich über 1. Dieser Wert sinkt bis zum 3. Prognosetag auf 1.01, liegt damit aber immer noch knapp über 1. Gemäß Abschnitt 5.2 ist damit das persistente Modell an allen drei Prognosetagen besser als die unkorrigierte CAMS-Prognose. Für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen hingegen liegt das 90. Perzentil der MQI_{Forecast} zwischen 0.822 am 1. Prognosetag und 0.779 am 3. Prognosetag, das MQO_{Forecast} ist somit in allen Fällen erfüllt (Abbildung 21, rechts).

Abbildung 20: Assessment Target Plots PM₁₀ Area-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognostetag



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 21: Forecast Target Plots PM₁₀ Area-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognostag



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

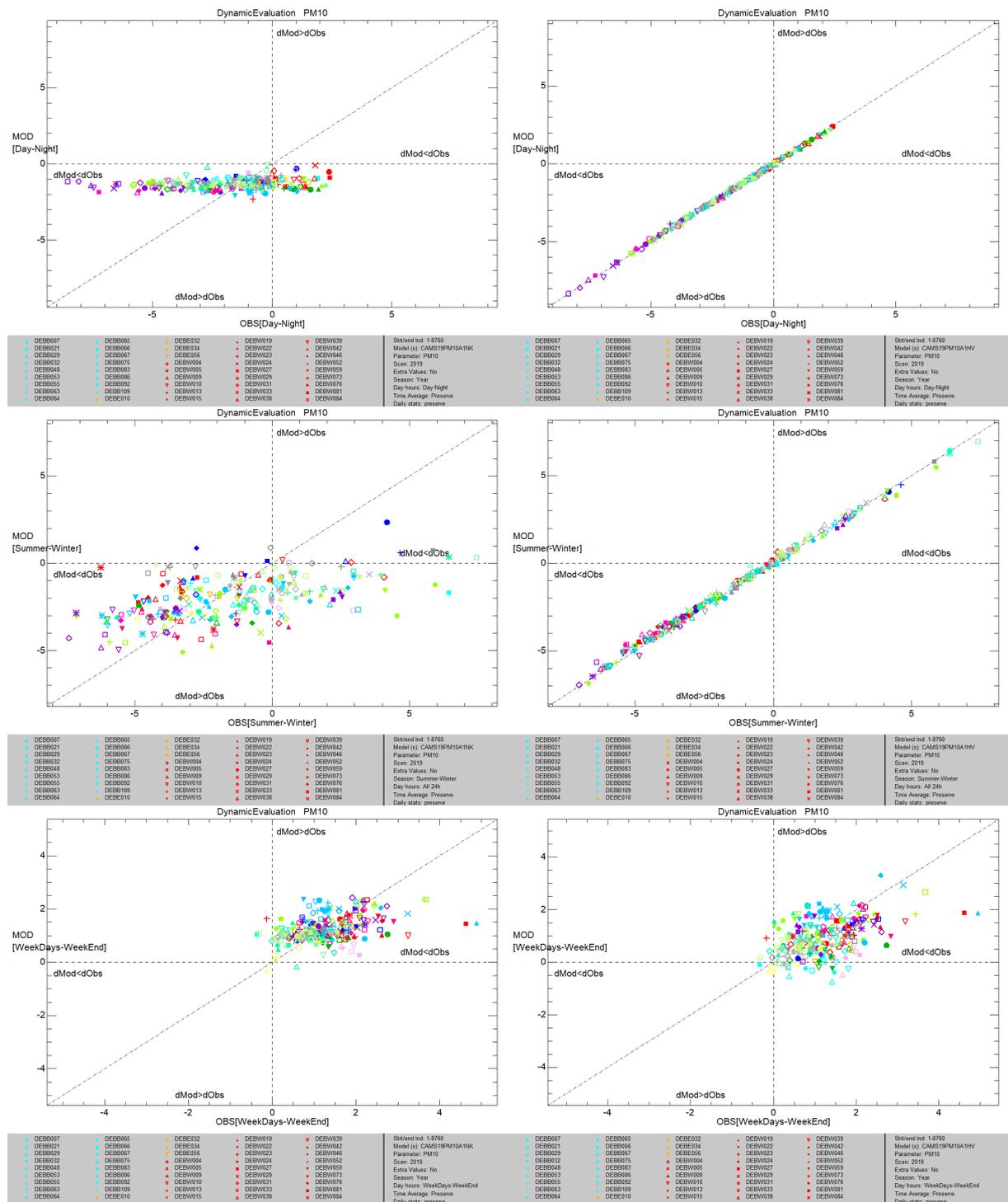
In Abbildung 22 ist die in Abschnitt 5.2 beschriebene dynamische Evaluierung für die Zeitbezüge Tag – Nacht (oben), Sommer – Winter (Mitte) und Wochentag – Wochenende (unten) für die PM₁₀-Area-Stationen dargestellt, jeweils für den 1. Prognostag.

Bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen (Abbildung 22, links) sind die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Tag und Nacht im Regelfall negativ, d. h. die modellierten PM₁₀-Konzentrationen sind im Mittel nachts höher als tagsüber. Zudem werden maximal Differenzen

von ca. $-2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ erreicht. Die mittleren Differenzen zwischen Tag und Nacht bei den Messwerten erreichen hingegen Werte bis zu $-9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ sowie im positiven Bereich bis zu $+3 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Die beobachteten mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht werden demnach durch die unkorrigierten CAMS-Prognosen an den meisten Stationen nicht korrekt wiedergegeben. Das Gleiche gilt prinzipiell auch für die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Sommer und Winter, auch wenn die Stationspunkte hier stärker gestreut sind und von den unkorrigierten CAMS-Prognosen immerhin mittlere Differenzen von bis zu ca. $-5 \mu\text{g}/\text{m}^3$ erreicht werden. In beiden Fällen führt die Korrektur der CAMS-Prognosen durch die Hybrid-Vorhersage dazu, dass die prognostizierten mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht bzw. zwischen Sommer und Winter mit den beobachteten Differenzen sehr gut übereinstimmen, so dass die Stationspunkte sehr nah entlang der 1:1-Diagonalen verteilt sind (Abbildung 22, rechts).

Die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Wochentag und Wochenende sind sowohl für die unkorrigierten CAMS-Prognosen als auch für die Messwerte im Regelfall positiv, d. h. die modellierten bzw. gemessenen PM_{10} -Konzentrationen sind im Mittel unter der Woche höher als am Wochenende. Allerdings ist die Streuung der einzelnen Stationspunkte um die 1:1-Diagonale sehr groß, d. h. auch hier werden die beobachteten mittleren Konzentrationsdifferenzen an den meisten Stationen nicht durch die Prognose erfasst (Abbildung 22, links unten). Im Gegensatz zu den oben betrachteten Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht sowie zwischen Sommer und Winter führt die Anwendung der Hybrid-Vorhersage bei den Konzentrationsdifferenzen zwischen Wochentag und Wochenende tendenziell eher zu einer noch stärkeren Streuung der Stationspunkte und damit zu einer Verschlechterung bei der dynamischen Evaluierung (Abbildung 22, rechts unten).

Abbildung 22: Dynamische Evaluierung PM₁₀ Area-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben: Tag – Nacht. Mitte: Sommer – Winter. Unten: Wochentag – Wochenende.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

7.2 PM₁₀: Spot-Stationen

7.2.1 Bezugsjahr 2019

Tabelle 8 zeigt die mit der Testumgebung berechneten statistischen Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen für PM₁₀-Stundenmittelwerte für alle drei Prognosetage, jeweils als Median über alle entsprechenden statistischen Kennwerte an den betrachteten Spot-Stationen für das Bezugsjahr 2019.

Demnach liegen Mittelwert, Maximalwert und Standardabweichung der unkorrigierten CAMS-Prognosen an den Spot-Stationen im Median ähnlich hoch wie an den Area-Stationen (vgl. Tabelle 6). Die entsprechenden Kennwerte der gemessenen Konzentrationen sind aber an den Spot-Stationen deutlich höher als an den Area-Stationen, so dass z. B. die modellierten Maximalwerte im Median nur noch ca. 25 % bis 30 % der gemessenen Maximalwerte erreichen. Die Korrelation liegt wie bei den Area-Stationen bei ca. 0.6. Der MFB ist an den Spot-Stationen im Median fast doppelt so hoch wie an den Area-Stationen, und auch der FGE ist an den Spot-Stationen deutlich höher. Ähnlich wie an den Area-Stationen sind die Medianwerte an den Spot-Stationen über die drei Prognosetage relativ konstant, nur Korrelation, MFB und FGE werden mit den Prognosetagen minimal schlechter.

Die Anwendung der Hybrid-Vorhersage führt auch an den Spot-Stationen zu einer effektiven Biaskorrektur, so dass Mittelwerte und Standardabweichungen der korrigierten CAMS-Prognosen im Median weitgehend denen der Messwerte entsprechen und auch die Maximalwerte deutlich besser erfasst werden. BIAS und MFB sind dementsprechend im Median nahe Null. Der Korrelationskoeffizient ist für die korrigierten CAMS-Prognosen wie bei den Area-Stationen im Median niedriger als für die unkorrigierten CAMS-Prognosen. Im Gegensatz zu den Area-Stationen ergeben sich aber für RMSE und FGE der korrigierten CAMS-Prognosen im Median niedrigere Werte als für die unkorrigierten CAMS-Prognosen, wobei auch an den Spot-Stationen RMSE und FGE stärker zunehmen als bei den unkorrigierten Prognosen.

Tabelle 8: PM₁₀-Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Spot-Stationen, 2019

Metrik	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS
	PT1	PT2	PT3	HV PT1	HV PT2	HV PT3
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.74	0.74	0.74	0.74	0.74	0.85
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.89	0.87	0.90	0.00	0.00	0.00
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.70	18.71	18.72	18.70	18.75	18.77
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	10.35	10.24	10.21	18.71	18.70	18.68
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	176.59	149.04	149.04	149.04	149.04	149.04
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	44.81	46.09	43.76	171.99	144.71	143.29
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	12.88	12.70	12.71	12.66	12.67	12.68
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	5.57	5.61	5.58	12.49	12.14	12.06
Korrelation [-]	0.64	0.63	0.59	0.58	0.49	0.42
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	13.34	13.34	13.49	11.54	12.55	13.35
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-8.23	-8.23	-8.27	0.00	0.00	-0.02
MFB [%]	-46.58	-46.88	-47.65	-1.14	-0.68	-0.88
FGE [%]	56.55	57.81	58.29	43.09	47.72	50.82

In Tabelle 9 sind die entsprechenden Medianwerte für die PM₁₀-Tagmittelwerte zusammengestellt. Wie bei den Area-Stationen (vgl. Tabelle 7) weisen die unkorrigierten CAMS-Prognosen die gleichen Tendenzen auf wie die Stundenmittelwerte, und der Korrelationskoeffizient ist mit Werten zwischen 0.77 (1. Prognosetag) und 0.74 (3. Prognosetag) deutlich höher als für die PM₁₀-Stundenmittelwerte. Die Anzahl der gemessenen Überschreitungen des Schwellenwertes von 50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ beträgt im Median 5 und ist damit auch an den Spot-Stationen sehr niedrig. Von diesen wenigen Überschreitungen wird im Median keine von den unkorrigierten CAMS-Prognosen erfasst, d. h. die Hit Rate beträgt im Median 0 %. Gleichzeitig wird vom Modell im Median aber auch keine Schwellenwertüberschreitung falsch vorhergesagt, d. h. die FAR beträgt im Median ebenfalls 0 %.

Nach Anwendung der Hybrid-Vorhersage werden auch bei den Tagesmittelwerten Mittelwerte, Maximalwerte und Standardabweichungen der Beobachtungen im Median gut durch die korrigierten CAMS-Prognosen erfasst. BIAS und MFB sind dementsprechend auch hier im Median nahe Null. Wie bei den Stundenmittelwerten und wie an den Area-Stationen nimmt der Korrelationskoeffizient über die Prognosetage stärker ab und RMSE und FGE nehmen stärker zu als bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen. Dabei sind RMSE und FGE im Median über alle Prognosetage durchweg niedriger als bei den unkorrigierten Prognosen. Der Korrelationskoeffizient ist wie an den Area-Stationen mit 0.79 am 1. Prognosetag etwas höher, sonst niedriger als bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen. Von den beobachteten Überschreitungen des Schwellenwertes von 50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ werden von den korrigierten CAMS-Prognosen am 1. Prognosetag immerhin im Median 25 % und am 3. Prognosetag immer noch rund 14 % erfasst, während die FAR an allen drei Prognosetagen deutlich unter 1 % liegt.

Tabelle 9: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognostetag (PT1 bis PT3), Median über alle Spot-Stationen, 2019

Metrik	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS
	PT1	PT2	PT3	HV PT1	HV PT2	HV PT3
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	3.34	3.34	3.34	3.39	3.39	3.39
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.56	2.54	2.67	3.28	2.69	2.21
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.73	18.70	18.71	18.76	18.78	18.81
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	10.34	10.22	10.16	18.72	18.72	18.73
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	65.34	65.34	65.34	65.04	65.03	65.34
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	29.96	31.13	31.01	63.98	62.38	60.40
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	9.80	9.80	9.81	9.80	9.83	9.84
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	4.79	4.83	4.84	9.49	9.09	8.98
Korrelation [-]	0.77	0.76	0.74	0.79	0.66	0.57
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	10.84	10.91	10.90	6.27	7.91	8.69
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-8.27	-8.24	-8.31	0.00	0.00	-0.03
MFB [%]	-50.71	-51.49	-52.74	0.64	1.12	1.21
FGE [%]	53.33	54.16	54.39	24.04	30.44	33.58
MeasExc ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	5	5	5	5	5	5
Hit Rate ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	0.00	0.00	0.00	25.00	18.18	14.29
FAR ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	0.00	0.00	0.00	0.84	0.58	0.60

¹: Schwellenwert $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$

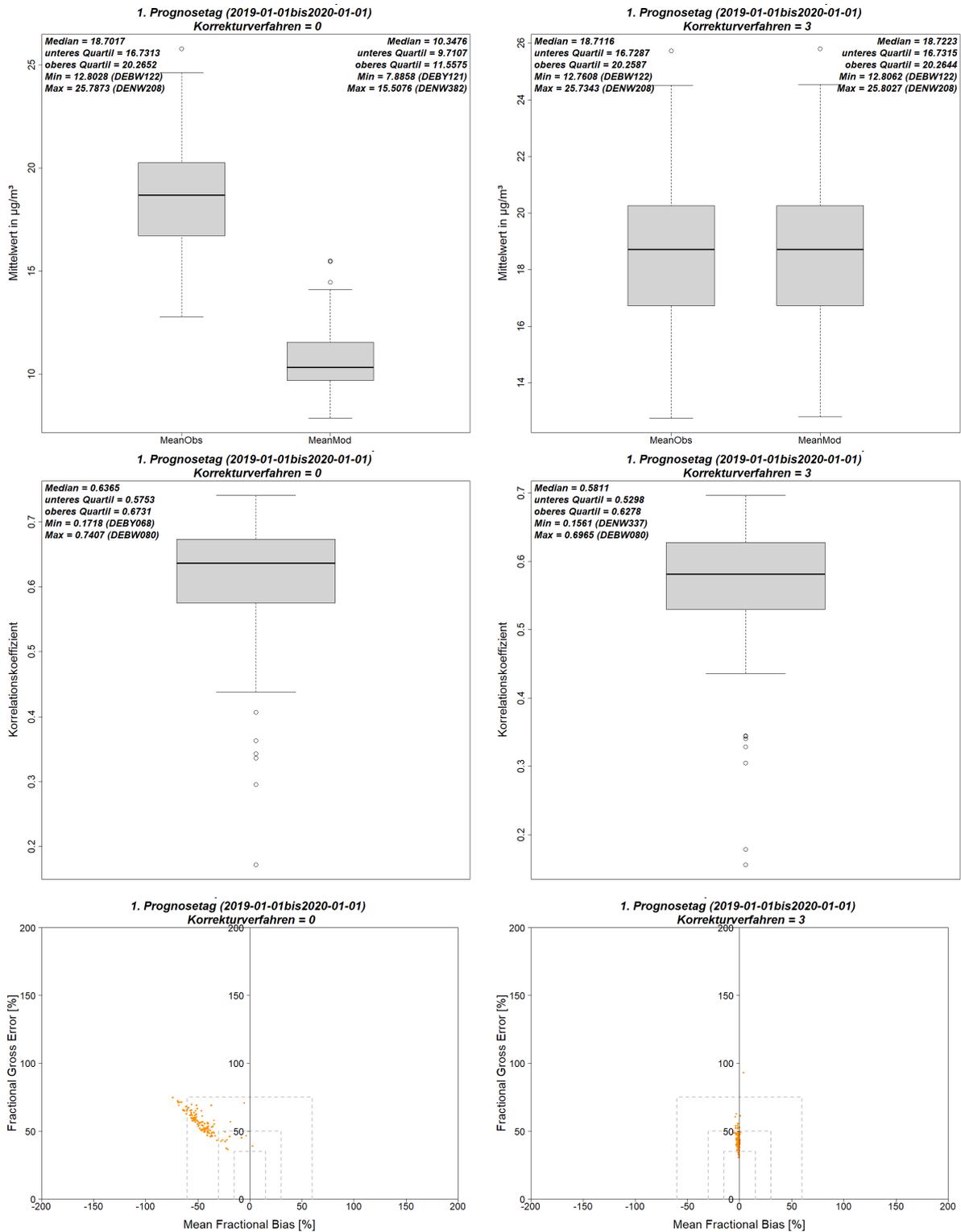
Abbildung 23 zeigt für die Spot-Stationen die Box-Whisker-Plots für Mittelwerte und Korrelationskoeffizienten sowie die Soccer-Plots, links für die unkorrigierten und rechts für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten PM₁₀-Prognosen der Stundenmittelwerte, jeweils für den ersten Prognostetag.

Wie schon bei den Area-Stationen zeigen die Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (Abbildung 23, oben) die effektive Biaskorrektur der prognostizierten PM₁₀-Stundenmittelwerte durch die Hybrid-Vorhersage. In den Box-Whisker-Plots der Korrelationskoeffizienten (Abbildung 23, Mitte) ist zu erkennen, dass der Korrelationskoeffizient bezüglich der Stundenmittelwerte durch die Hybrid-Vorhersage über den gesamten Wertebereich des betrachteten Stationskollektivs gleichmäßig abnimmt.

Der Soccer-Plot für die unkorrigierten CAMS-Prognosen (Abbildung 23, unten links) zeigt, dass im Gegensatz zu den Area-Stationen nur an sehr wenigen Spot-Stationen ein positiver MFB auftritt, fast alle Stationen weisen einen negativen MFB auf. Zudem weisen die Stationspunkte eine stärkere lineare Gruppierung auf als die Area-Stationen (vgl. Abbildung 15, unten links), was darauf hindeutet, dass an den Spot-Stationen bei den PM₁₀-Stundenmittelwerten eher systematische Fehler in den CAMS-Prognosedaten dominieren. Durch die Korrektur mit der Hybrid-Vorhersage gruppieren sich die Stationspunkte eng um die y-Achse, d. h. der MFB geht

an allen Stationen deutlich zurück, wobei der Schwerpunkt der Stationspunkte weiterhin im negativen Bereich des MFB liegt (Abbildung 23, unten rechts).

Abbildung 23: PM₁₀-Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (oben) und Korrelationskoeffizienten (Mitte) an den Stationsorten sowie Soccer Plots (unten) über alle Spot-Stationen, 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.

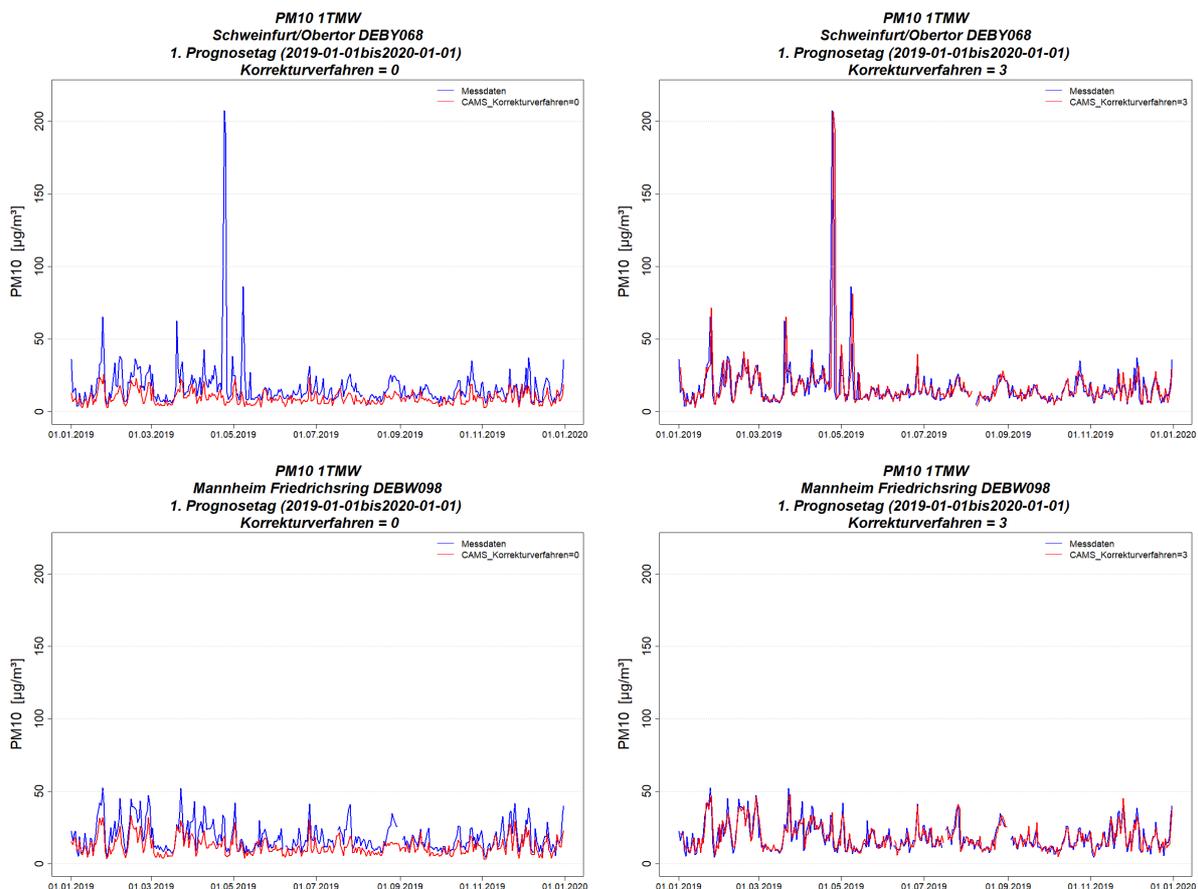


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 24 sind beispielhaft die Zeitreihen der PM₁₀-Tagesmittelwerte 2019 für die Station mit dem niedrigsten (oben, Station DEBY068 Schweinfurt/Obertor) und mit dem höchsten (unten, Station DEBW098 Mannheim Friedrichsring) Korrelationskoeffizienten für die Tagesmittelwerte der unkorrigierten CAMS-Prognosen abgebildet. Links sind dabei die Zeitreihen der unkorrigierten und rechts die Zeitreihen der korrigierten CAMS-Prognosen dargestellt.

Wie schon für die Area-Stationen ist die generelle Unterschätzung der Messwerte durch die unkorrigierten CAMS-Prognosen gut in den Zeitreihen zu erkennen. Der niedrige Korrelationskoeffizient für die Station DEBY068 wird wie schon bei der Area-Station DEBB053 (Abbildung 16, oben) v. a. durch eine Episode mit sehr hohen gemessenen PM₁₀-Konzentrationen verursacht, die hier Ende April und Anfang Mai 2019 auftritt und die von den unkorrigierten CAMS-Prognosen nicht erfasst wird. Die Episoden im ersten Quartal 2019 hingegen, die in ähnlicher Form auch an den gezeigten Area-Stationen DEBB053 und DEBW038 auftreten (Abbildung 16), werden an den in Abbildung 24 dargestellten Spot-Stationen zumindest im Ansatz erfasst, wenn auch die Maximalwerte auch hier nicht korrekt prognostiziert wurden.

Abbildung 24: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



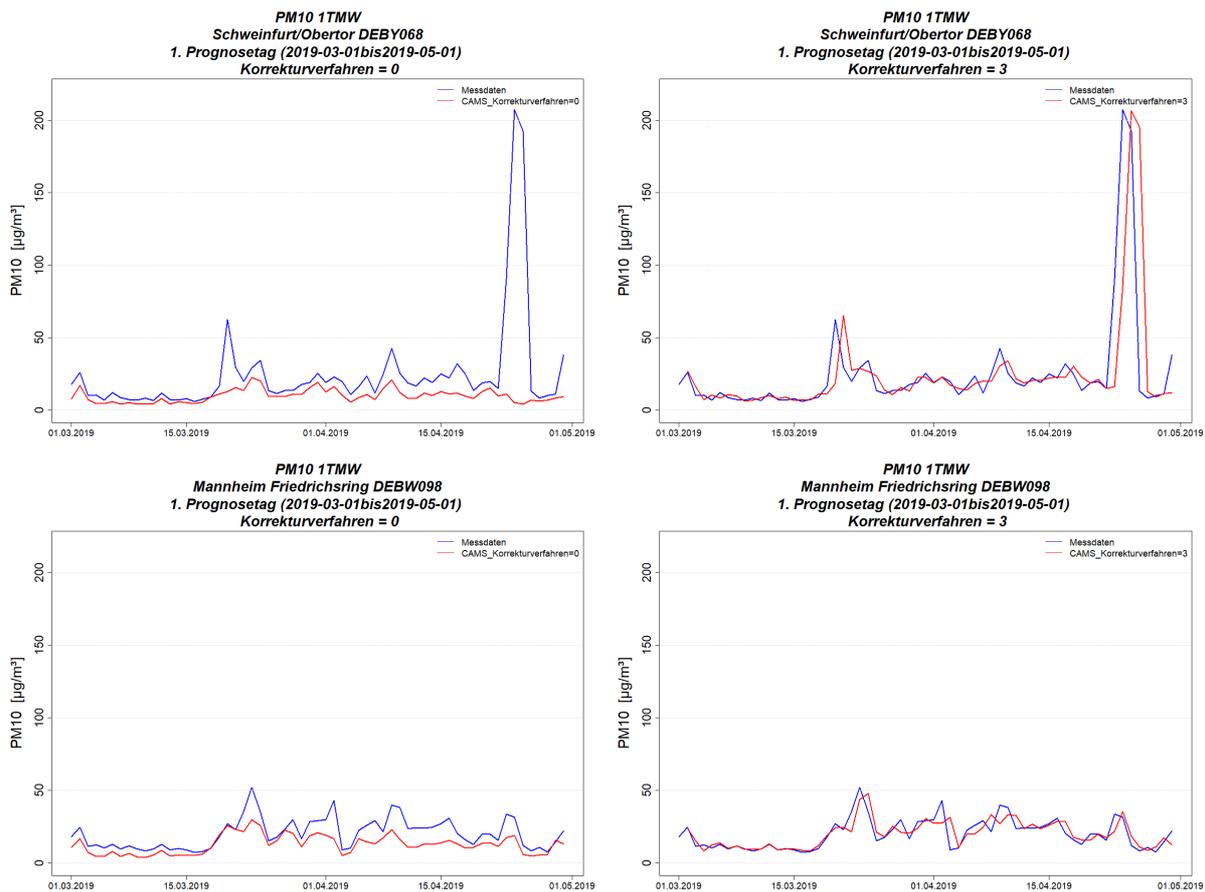
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Analog zu den Area-Stationen führt die Korrektur der CAMS-Prognose durch die Hybrid-Vorhersage auch für die Spot-Stationen zu einer deutlich besseren Erfassung der Zeitreihe und ihrer Maximalwerte (Abbildung 24, rechts). Ebenso zeigt aber die genauere Betrachtung z. B. der Monate März und April 2019 (Abbildung 25), dass durch die Anwendung der Hybrid-Vorhersage

auch hier ein zeitlicher Verzögerung von einem Tag hervorgerufen wird, mit dem einzelne Konzentrationsspitzen erfasst werden. Trotzdem erhöht sich der Korrelationskoeffizient für Tagesmittelwerte für die Station DEBY068 durch die Korrektur von 0.31 auf 0.64.

Für die Station DEBW098 hingegen, die einen etwas glatteren Konzentrationsverlauf mit längeren Episoden aufweist, ist der durch die Hybrid-Vorhersage eingeführte zeitliche Verzögerung weniger relevant. Wie schon für die Area-Station DEBW038 (Abbildung 17) wird der zeitliche Konzentrationsverlauf bereits durch die unkorrigierten CAMS-Prognosen in Teilen recht gut beschrieben und erfährt durch die Korrektur eine Verbesserung insbesondere in den Maximalwerten. Der Korrelationskoeffizient für Tagesmittelwerte wird durch die Korrektur nur minimal erhöht, er liegt ohne und mit Korrektur bei 0.87.

Abbildung 25: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosetag, Zeitraum März und April 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.

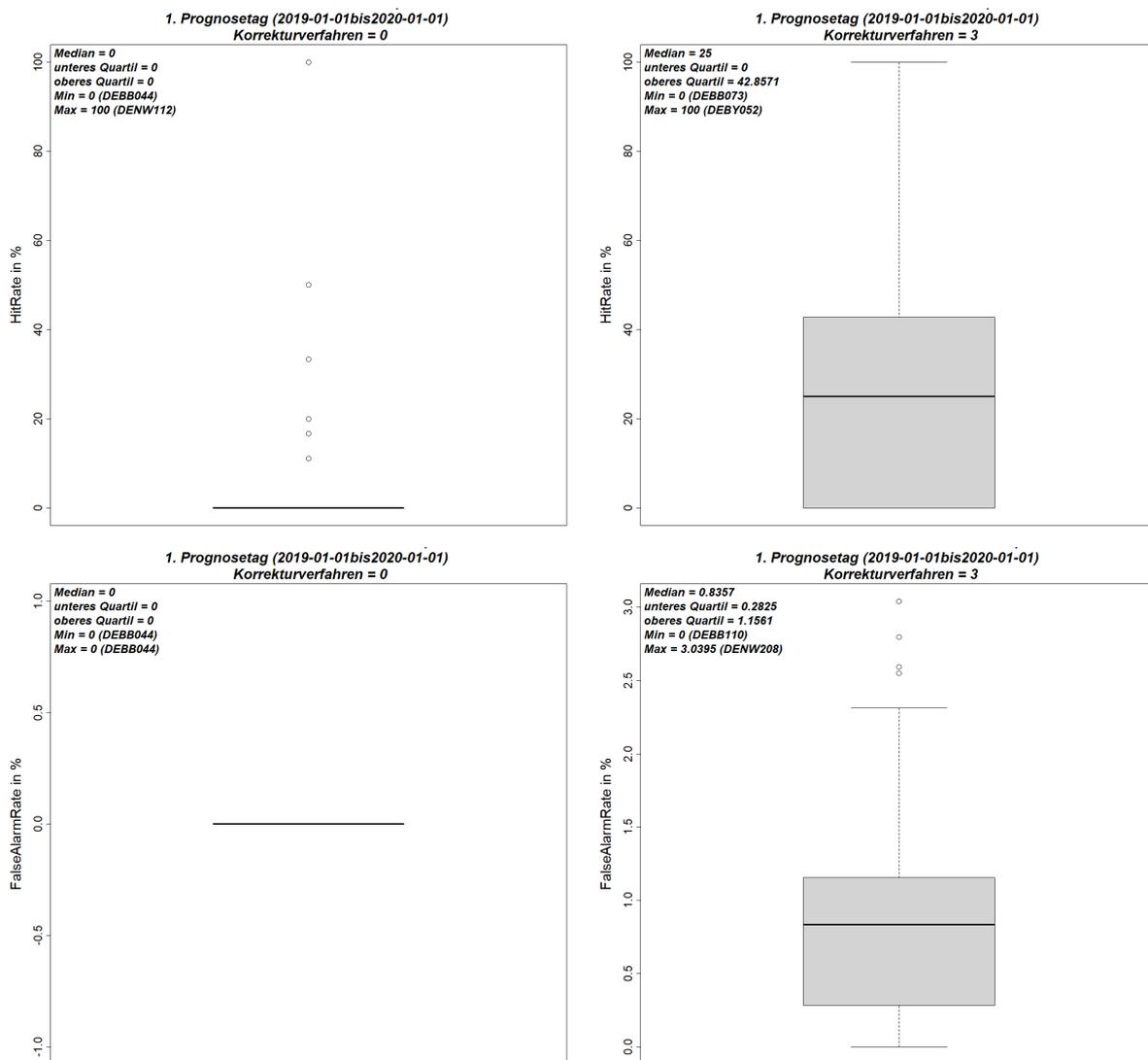


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Die Betrachtung der statistischen Kennwerte zu den Schwellenwertüberschreitungen, d. h. Hit Rate und FAR, ist auch für die PM₁₀-Tagesmittelwerte an den Spot-Stationen nicht sehr aussagekräftig, da nur wenige Schwellenwertüberschreitungen beobachtet wurden. Im Median wurden im Jahr 2019 fünf Überschreitung des Schwellenwertes von 50 µg/m³ beobachtet, im Maximum traten 23 Überschreitungen auf (an der Station DEBW118 Stuttgart Am Neckartor). Abbildung 26 zeigt die Box-Whisker-Plots der Hit Rate und der FAR für die PM₁₀-Tagesmittelwerte, jeweils für den ersten Prognosetag. Die unkorrigierten CAMS-Prognosen erfassen wie schon bei den Area-Stationen (Abbildung 18) nur an wenigen Stationen überhaupt eine Über-

schreitung, die maximale Hit Rate liegt aber hier bei 100 %, die sich auf genau eine beobachtete Überschreitung beziehen. Die FAR beträgt für die unkorrigierten CAMS-Prognosen nicht nur im Median, sondern an allen Spot-Stationen 0 %. Durch die Korrektur mit der Hybrid-Vorhersage erhöhen sich Hit Rate und FAR. Für die Hit Rate ergibt sich ein Medianwert von 25 % (vgl. Tabelle 9), das obere Quartil liegt bei knapp 43 %, und der Maximalwert liegt bei 100 %, die sich auf genau eine beobachtete Überschreitung beziehen. Die FAR erhöht sich durch die Korrektur im Median auf 0.84 % und im Maximum auf rund 3 %.

Abbildung 26: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Hit Rate (oben) und der False Alarm Rate (unten) an den Stationsorten über alle Spot-Stationen bei einem Schwellenwert von 50 µg/m³. 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



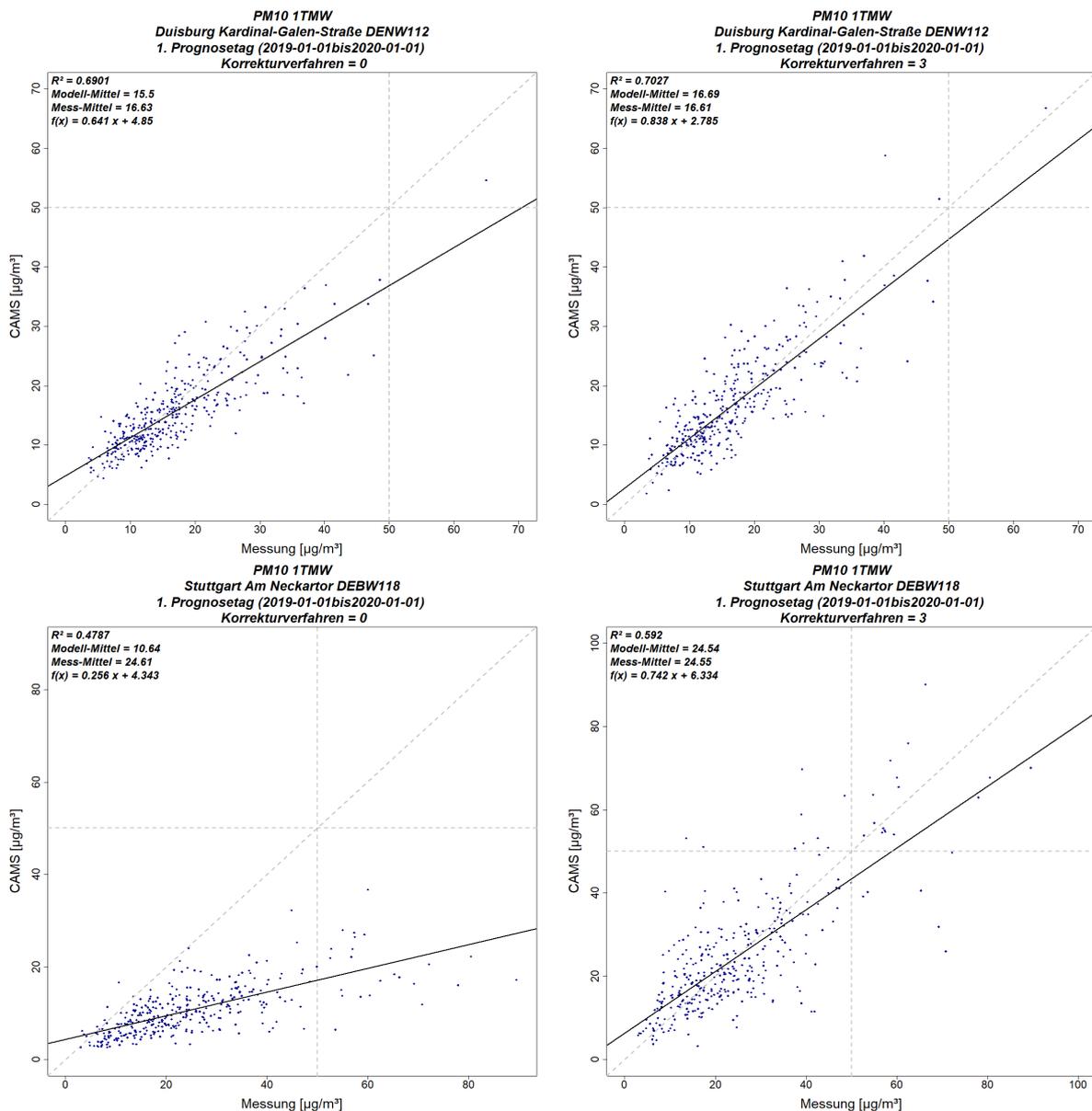
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 27 sind beispielhaft die Scatterplots der PM₁₀-Tagesmittelwerte für zwei Stationen dargestellt, von denen die eine die maximale Hit Rate von 100 % bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen aufweist (DENW112 Duisburg Kardinal-Galen-Straße, oben) und die andere die maximale Anzahl von beobachteten Überschreitungen (23 Überschreitungen, DEBW118

Stuttgart Am Neckartor, unten) und gleichzeitig eine hohe Hit Rate von 72.7 % bei den korrigierten CAMS-Prognosen.

Für die Station DENW112 ändert sich die Hit Rate durch Anwendung der Hybrid-Vorhersage nicht, d. h. die eine beobachtete Schwellenwertüberschreitung an dieser Station wird auch nach der Korrektur korrekt erfasst. Die FAR steigt geringfügig von 0 % auf 0.58 %, was in diesem konkreten Fall bedeutet, dass durch die Hybrid-Vorhersage in zwei Fällen eine Schwellenwertüberschreitung vom Modell falsch vorhergesagt wurde. Für die Station DEBW118 steigt die Hit Rate durch die Anwendung der Hybrid-Vorhersage von 0 % auf 72.7 % und die FAR von 0% auf 2.8 % an. Durch die Korrektur wurde zudem der Mittelwert der Prognosedaten auf den Mittelwert der Messdaten angehoben, und das Bestimmtheitsmaß verbessert sich von 0.48 auf 0.59.

Abbildung 27: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Scatterplots mit hohen Werten für die Hit Rate in den unkorrigierten (oben) bzw. in den korrigierten CAMS-Prognosen (unten). 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

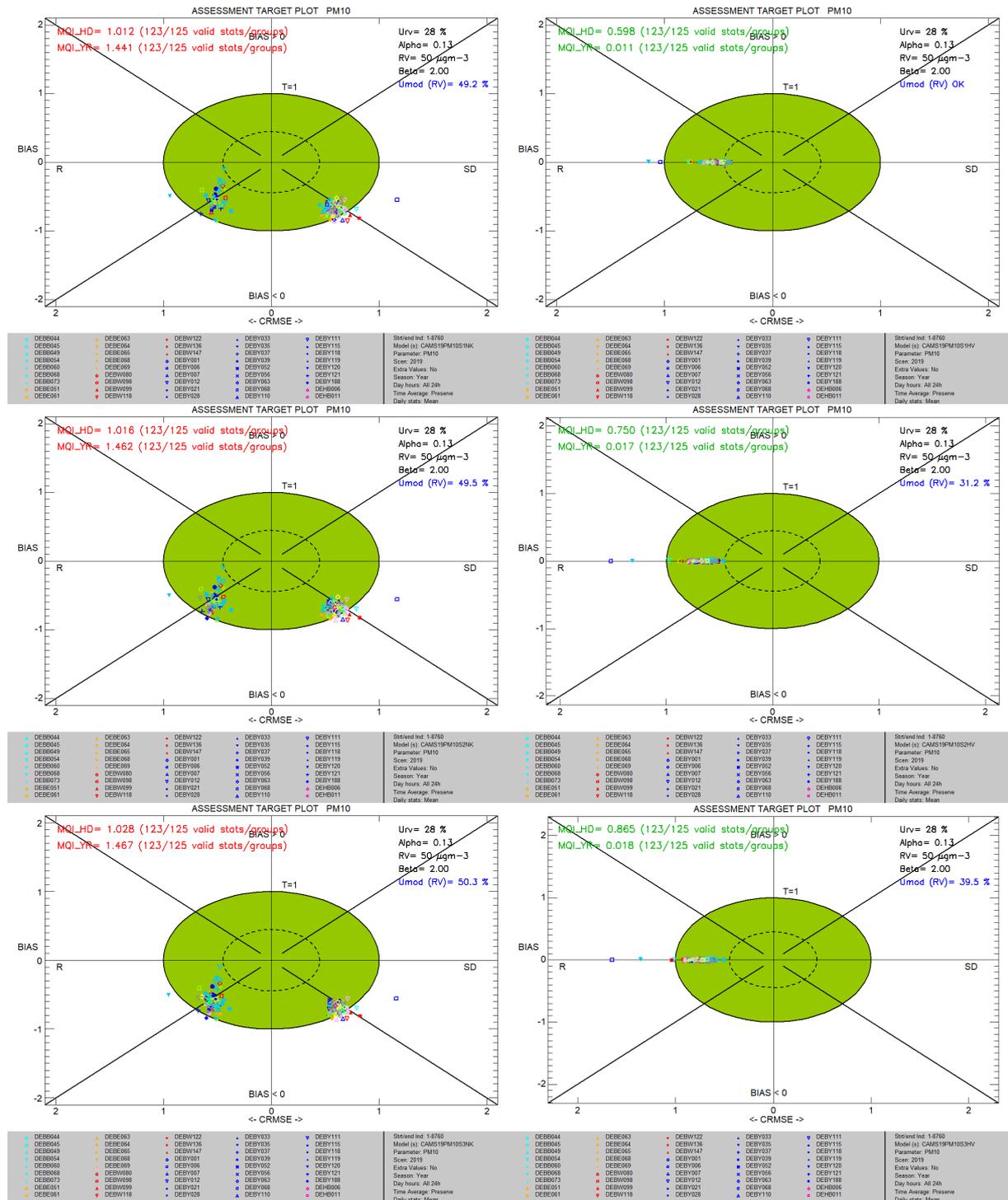
Abbildung 28 zeigt die mit dem FAIRMODE-DELTA-Tool erzeugten Assessment Target Plots für die PM₁₀-Spot-Stationen für alle drei Prognosestage, wie bereits bisher links für die unkorrigierten und rechts für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen. Ausgewertet wurden für PM₁₀ die Tagesmittelwerte.

An den Spot-Stationen wird das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO für die unkorrigierten CAMS-Prognosen an keinem der drei Prognosestage erfüllt. Der stundenbezogene Hauptindikator MQI_{HD} liegt an allen drei Prognosestagen knapp über 1, und der auf das Jahr bezogene MQI_{YR} liegt mit Werten zwischen 1.441 und 1.467 deutlich über 1, wobei die Werte von Prognosestag 1 nach Prognosestag 3 geringfügig ansteigen. Wie bei den Area-Stationen teilen sich die Stationspunkte in zwei Cluster auf. Für den einen Teil der Stationen wird der Modellfehler durch den Korrelationskoeffizienten dominiert (R, linke Hälfte des Target Plots) und für den anderen Teil durch die Standardabweichung (SD, rechte Hälfte des Target Plots). Vor allem in dem Cluster, in dem der Modellfehler durch die Standardabweichung dominiert wird, liegen eine ganze Reihe der Stationspunkte außerhalb der grünen Ellipse. In dem Cluster, in dem der Modellfehler durch den Korrelationskoeffizienten dominiert wird, ist das nur für wenige Stationen der Fall. Alle Stationspunkte zeigen einen negativen Bias.

Die Korrektur durch die Hybrid-Vorhersage reduziert wie schon bei den Area-Stationen den MQI_{YR} drastisch von 1.441 auf 0.011 am 1. Prognosestag, der MQI_{YR} steigt auch bis zum 3. Prognosestag nur geringfügig auf 0.018 an. Der MQI_{HD} ist nach der Korrektur am 1. Prognosestag mit 0.598 ebenfalls deutlich niedriger als für die unkorrigierten Prognosen, für die ein MQI_{HD} von 1.012 berechnet wurde. Der MQI_{HD} steigt für die korrigierten Prognosen über die Prognosestage an, ist aber am 3. Prognosestag mit 0.865 immer noch niedriger als für die unkorrigierten Prognosen am 1. Prognosestag, und insbesondere ist damit das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO für die korrigierten CAMS-Prognosen für alle drei Prognosestage erfüllt. Der bereits bei der Auswertung der statistischen Kennwerte beschriebene geringe Bias der korrigierten Prognosen zeigt sich in den Assessment Target Plots darin, dass die Stationspunkte alle sehr dicht an der x-Achse liegen. Einige wenige Stationspunkte kommen hier dabei außerhalb der grünen Ellipse zu liegen. Wie bei den Area-Stationen wird der Modellfehler im Unterschied zu den unkorrigierten Prognosen an allen Stationen durch den Korrelationskoeffizienten (R) dominiert. Wie in Abschnitt 7.1 beschrieben, wird davon ausgegangen, dass der Grund dafür in dem zeitlichen Verzug der korrigierten Zeitreihen liegt, der oben insbesondere für kurze Episoden mit hohen Konzentrationswerten beschrieben wurde.

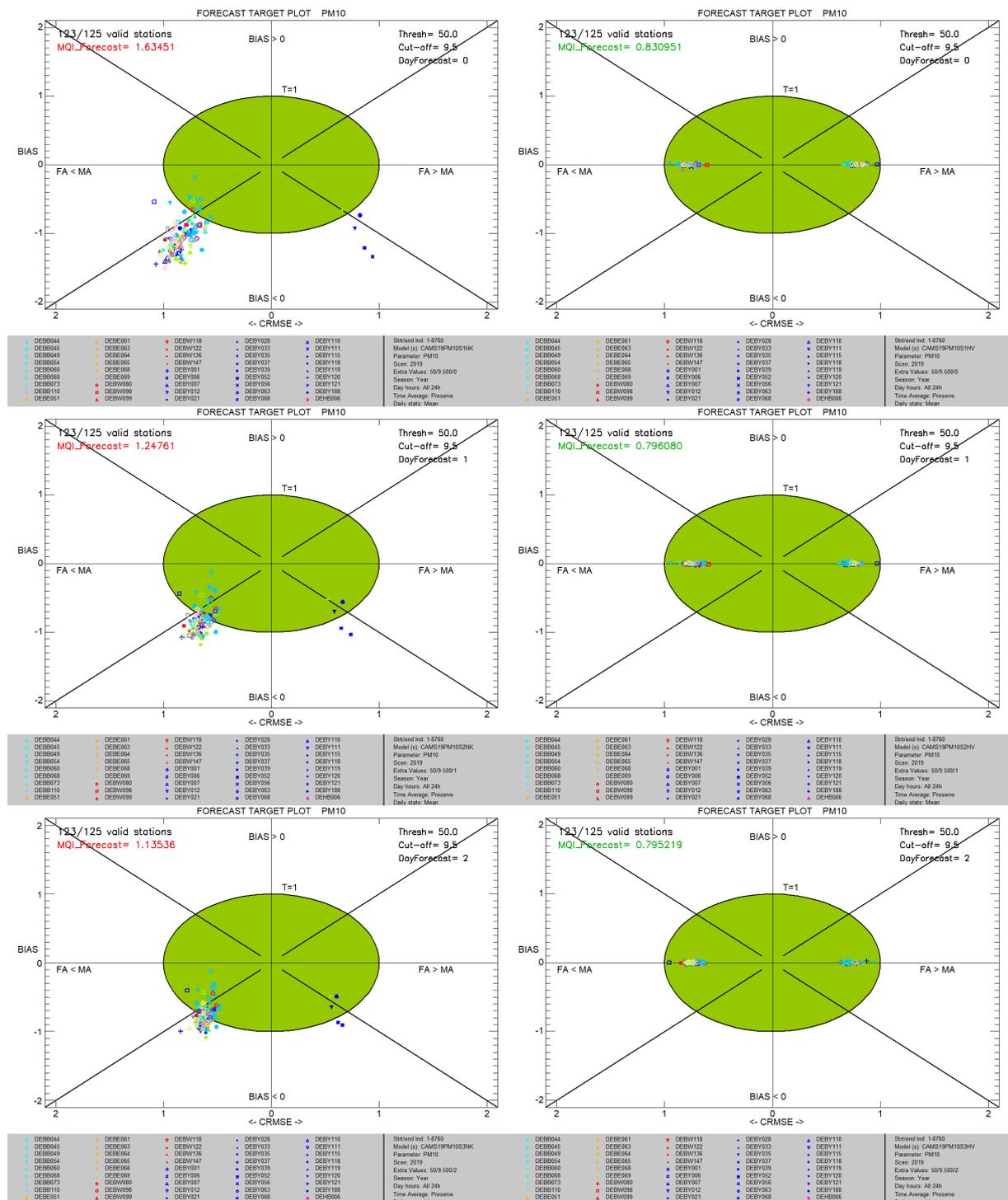
Im Forecast-Modus erfüllen die unkorrigierten CAMS-Prognosen das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO_{Forecast} an keinem der drei Prognose-Tage (Abbildung 29, links). Insbesondere am 1. Prognosestag liegen die meisten Stationspunkte außerhalb der grünen Ellipse, d. h. sie erfüllen das Kriterium $MQI_{Forecast} \leq 1$ nicht. Entsprechend liegt auch das angegebene 90. Perzentil der MQI_{Forecast} aller Stationen mit 1.635 deutlich über 1. Dieser Wert sinkt bis zum 3. Prognosestag auf 1.135, liegt damit aber immer noch über 1. Gemäß Abschnitt 5.2 ist damit das persistente Modell auch an den PM₁₀-Spot-Stationen an allen drei Prognosestagen besser als die unkorrigierte CAMS-Prognose. Für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen hingegen liegt das 90. Perzentil der MQI_{Forecast} zwischen 0.831 am 1. Prognosestag und 0.795 am 3. Prognosestag, das MQO_{Forecast} ist somit in allen Fällen erfüllt (Abbildung 29, rechts).

Abbildung 28: Assessment Target Plots PM₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognosetag



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 29: Forecast Target Plots PM₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognostetag



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 30 ist die dynamische Evaluierung für die Zeitbezüge Tag – Nacht (oben), Sommer – Winter (Mitte) und Wochentag – Wochenende (unten) für die PM₁₀-Spot-Stationen dargestellt, jeweils für den 1. Prognostetag.

Bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen (Abbildung 30, links) sind analog zu den entsprechenden Auswertungen an den Area-Stationen (vgl. Abbildung 22) die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Tag und Nacht im Regelfall negativ, d. h. die modellierten PM₁₀-

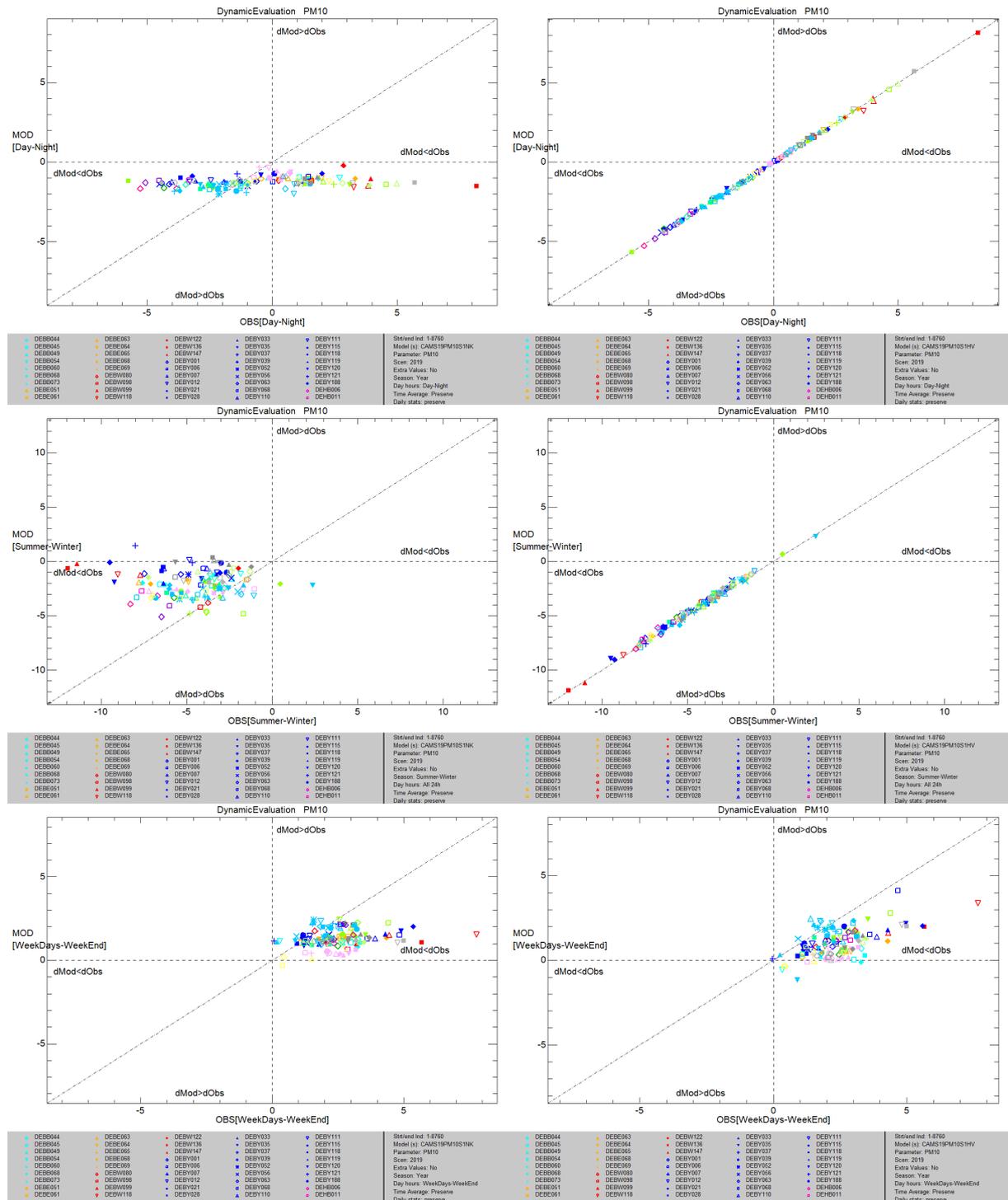
Konzentrationen sind im Mittel nachts höher als tagsüber. Es werden maximal Differenzen von ca. $-2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ erreicht. Die mittleren Differenzen zwischen Tag und Nacht bei den Messwerten erreichen hingegen Werte bis zu $-6 \mu\text{g}/\text{m}^3$ sowie im positiven Bereich bis zu $+8 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Die beobachteten mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Tag und Nacht werden demnach auch an den meisten Spot-Stationen nicht korrekt durch die unkorrigierten CAMS-Prognosen wiedergegeben.

Die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Sommer und Winter (Abbildung 30, Mitte) sind für die unkorrigierten CAMS-Prognosen ebenfalls im Regelfall negativ, d. h. die modellierten PM_{10} -Konzentrationen sind im Mittel im Winter höher als im Sommer. Hier sind im Gegensatz zu den Auswertungen an den Area-Stationen die mittleren Differenzen bei den Messwerten ebenfalls bis auf wenige Ausnahmen negativ. Allerdings ergeben sich bei den CAMS-Prognosen Differenzen bis zu $-5 \mu\text{g}/\text{m}^3$, während bei den Messwerten Differenzen bis zu $-12 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auftreten, und die Stationspunkte sind deutlich stärker gestreut als bei den Tag – Nacht – Konzentrationsdifferenzen.

In beiden Fällen führt die Korrektur der CAMS-Prognosen durch die Hybrid-Vorhersage dazu, dass die prognostizierten mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht bzw. zwischen Sommer und Winter mit den beobachteten Differenzen sehr gut übereinstimmen, so dass die Stationspunkte sehr nah entlang der 1:1-Diagonalen verteilt sind (Abbildung 30, rechts).

Die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Wochentag und Wochenende sind sowohl für die unkorrigierten CAMS-Prognosen als auch für die Messwerte im Regelfall positiv, d. h. die modellierten bzw. gemessenen PM_{10} -Konzentrationen sind im Mittel unter der Woche höher als am Wochen-ende. Dabei erreichen die CAMS-Prognosen Konzentrationsdifferenzen von bis zu $+3 \mu\text{g}/\text{m}^3$, während die Messdaten Konzentrationsdifferenzen von bis zu $+8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ erreichen, d. h. auch hier werden die beobachteten mittleren Konzentrationsdifferenzen an den meisten Stationen nicht durch die Prognose erfasst (Abbildung 30, links unten). Im Gegensatz zu den oben betrachteten Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht sowie zwischen Sommer und Winter führt die Anwendung der Hybrid-Vorhersage bei den Konzentrationsdifferenzen zwischen Wochentag und Wochenende wie bei den Area-Stationen tendenziell eher zu einer noch stärkeren Streuung der Stationspunkte und damit zu einer Verschlechterung bei der dynamischen Evaluierung (Abbildung 30, rechts unten).

Abbildung 30: Dynamische Evaluierung PM₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), 1. Prognostag, Bezugsjahr 2019. Oben: Tag – Nacht. Mitte: Sommer – Winter. Unten: Wochentag – Wochenende.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

7.2.2 Bezugsjahr 2016

Bezugsjahr der Evaluierungen im vorliegenden Projekt war das Jahr 2019. Für PM₁₀ wurde zudem in Ergänzung zu ersten Untersuchungen für Area-Stationen für das Bezugsjahr 2016 in IVU Umwelt (2018) PM₁₀ an Spot-Stationen im Bezugsjahr 2016 betrachtet (vgl. Abschnitt 3.1).

In Tabelle 10 sind dementsprechend die mit der Testumgebung berechneten statistischen Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen für PM₁₀-Stundenmittelwerte für 2016 aufgeführt, wie zuvor für alle drei Prognosetage und jeweils als Median über alle entsprechenden statistischen Kennwerte an den betrachteten Spot-Stationen.

Die statistischen Kennwerte für die unkorrigierten PM₁₀-CAMS-Prognosen an den Spot-Stationen weisen für das Bezugsjahr 2016 ein ähnliches Verhalten auf wie für das Bezugsjahr 2019. Der Mittelwert der modellierten Werte an den Stationsorten erreicht im Median etwas mehr als 50 % des Mittelwerts über die gemessenen Werte, die modellierten Maximalwerte erreichen im Median ca. ein Drittel der beobachteten Maximalwerte, und die Standardabweichung der modellierten Werte beträgt im Median etwas weniger als die Hälfte der Standardabweichung der gemessenen Werte. Der Korrelationskoeffizient liegt allerdings für 2016 mit Werten zwischen 0.52 am 1. Prognosetag und 0.48 am 3. Prognosetag rund 10 Prozentpunkte niedriger als für 2019. MFB und FGE hingegen sind für 2016 geringfügig niedriger als für 2019. Dabei sind die Medianwerte für 2016 wie für 2019 über die drei Prognosetage relativ konstant, nur Korrelation und modellierter Maximalwert nehmen mit den Prognosetagen geringfügig ab.

Die Anwendung der Hybrid-Vorhersage führt wie in den bisher betrachteten Fällen zu einer effektiven Biaskorrektur, so dass Mittelwerte und Standardabweichungen der korrigierten CAMS-Prognosen im Median weitgehend denen der Messwerte entsprechen und auch die Maximalwerte deutlich besser erfasst werden. BIAS und MFB weisen dementsprechend im Median sehr geringe Werte auf. Der Korrelationskoeffizient ist für den 1. Prognosetag mit 0.51 für die korrigierten CAMS-Prognosen ähnlich hoch wie für die unkorrigierten CAMS-Prognosen, nimmt dann aber stärker ab und beträgt am 3. Prognosetag 0.37. Der RMSE ist für die korrigierten Prognosen am 1. und 2. Prognosetag niedriger und am 3. Prognosetag höher als für die unkorrigierten Prognosen. Der FGE ist für die korrigierten Prognosen für alle drei Prognosetage niedriger als für die unkorrigierten Prognosen, wobei der FGE für die korrigierten Prognosen über die drei Prognosetage zunimmt, während er für die unkorrigierten Prognosen im Gegensatz zu 2019 nahezu konstant bleibt.

Tabelle 10: PM₁₀-Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Spot-Stationen, 2016

Metrik	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS
	PT1	PT2	PT3	HV PT1	HV PT2	HV PT3
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.73	0.73	0.73	0.73	0.73	0.73
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.98	1.08	1.04	0.00	0.00	0.00
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	20.59	20.52	20.51	20.50	20.47	20.40
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	11.87	11.74	11.79	20.65	20.56	20.59
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	185.05	142.30	142.30	141.95	142.30	142.30
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	54.61	51.06	48.91	183.06	141.40	139.97
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	13.72	13.20	13.16	13.21	13.15	12.92
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	6.46	6.20	6.11	13.94	13.30	13.23
Korrelation [-]	0.52	0.51	0.48	0.51	0.42	0.37
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	14.05	13.95	14.05	13.34	13.77	14.49
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-7.93	-7.96	-7.84	0.10	0.09	0.22
MFB [%]	-41.08	-41.42	-40.25	-2.14	-2.20	-1.65
FGE [%]	54.71	54.65	55.24	44.76	48.98	52.37

In Tabelle 11 sind die entsprechenden Medianwerte für die PM₁₀-Tagmittelwerte zusammengestellt. Wie für das Bezugsjahr 2019 (vgl. Tabelle 9) weisen die unkorrigierten CAMS-Prognosen die gleichen Tendenzen auf wie die Stundenmittelwerte, und der Korrelationskoeffizient ist mit Werten zwischen 0.62 (1. Prognosetag) und 0.58 (3. Prognosetag) deutlich höher als für die PM₁₀-Stundenmittelwerte. Die Anzahl der gemessenen Überschreitungen des Schwellenwertes von 50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ beträgt auch 2016 im Median nur 5 und ist damit sehr niedrig. Von diesen wenigen Überschreitungen wird wie für 2019 im Median keine von den unkorrigierten CAMS-Prognosen erfasst, d. h. die Hit Rate beträgt im Median 0 %. Gleichzeitig wird vom Modell im Median aber auch keine Schwellenwertüberschreitung falsch vorhergesagt, d. h. die FAR beträgt im Median ebenfalls 0 %.

Nach Anwendung der Hybrid-Vorhersage werden auch bei den Tagesmittelwerten Mittelwerte, Maximalwerte und Standardabweichungen der Beobachtungen im Median gut durch die korrigierten CAMS-Prognosen erfasst. BIAS und MFB sind dementsprechend auch hier im Median nahe Null. Der Korrelationskoeffizient nimmt für die korrigierten CAMS-Prognosen wie bisher über die Prognosetage stärker ab und RMSE und FGE nehmen stärker zu als bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen. Dabei sind RMSE und FGE im Median über alle Prognosetage durchweg niedriger als bei den unkorrigierten Prognosen. Der Korrelationskoeffizient ist wie für 2019 am 1. Prognosetag höher und sonst niedriger als bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen. Von den beobachteten Überschreitungen des Schwellenwertes von 50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ werden von den korrigierten CAMS-Prognosen am 1. Prognosetag immerhin im Median ca. 33 % und am 2. Prognosetag immer noch rund 17 % erfasst, am 3. Prognosetag jedoch keine mehr. Die FAR liegt an allen drei Prognosetagen deutlich unter 1 %.

Tabelle 11: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Spot-Stationen, 2016

Metrik	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS
	PT1	PT2	PT3	HV PT1	HV PT2	HV PT3
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	3.54	3.54	3.54	3.54	3.54	3.60
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	3.13	3.09	2.91	3.45	2.49	2.46
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	20.60	20.54	20.45	20.52	20.53	20.32
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	11.86	11.73	11.77	20.64	20.56	20.54
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	80.84	74.10	74.10	74.10	74.10	72.86
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	39.78	35.68	35.09	77.93	78.15	73.37
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	10.31	10.11	10.11	10.15	10.07	9.88
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	5.65	5.38	5.25	10.17	10.06	10.05
Korrelation [-]	0.62	0.61	0.58	0.72	0.57	0.49
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	11.45	11.51	11.60	7.53	9.49	10.07
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-7.93	-7.95	-7.84	0.10	0.09	0.22
MFB [%]	-46.13	-46.79	-45.89	0.35	0.43	1.01
FGE [%]	50.21	50.39	50.54	25.10	32.14	35.12
MeasExc ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	5	5	5	5	4 ²	4 ²
Hit Rate ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	0.00	0.00	0.00	33.33	16.67	0.00
FAR ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	0.00	0.00	0.00	0.85	0.86	0.90

¹: Schwellenwert $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$

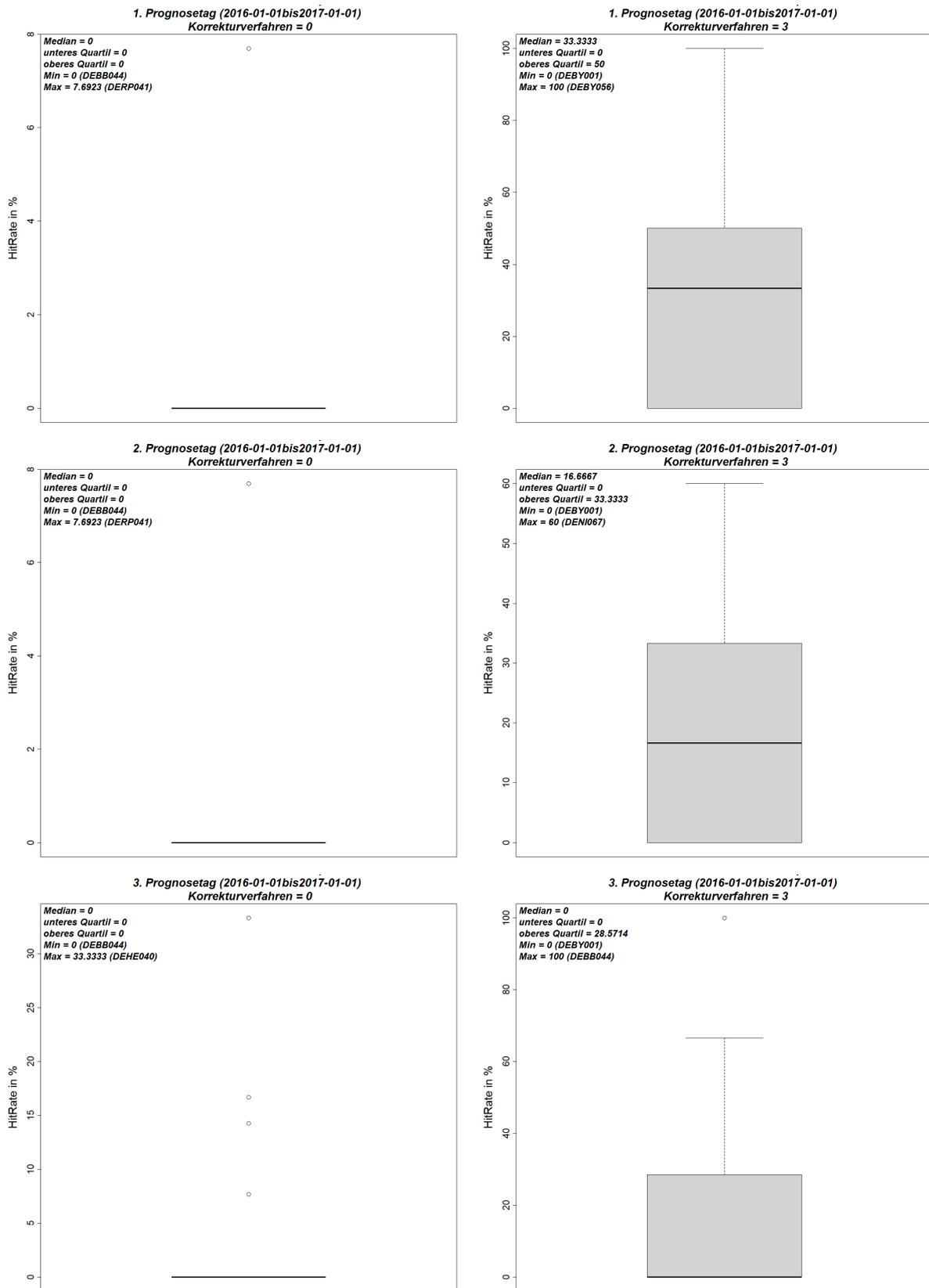
²: Die Anzahl der Überschreitungen kann bei den korrigierten Prognosen für die höheren Prognosetage geringer sein als für den 1. Prognosetag. Grund dafür ist, dass das Korrekturverfahren Daten aus der Vorlaufzeit benötigt und deshalb am Anfang einer Zeitreihe keine Werte berechnen kann. Die Anzahl der Zeitpunkte, zu denen noch kein Wert berechnet werden kann, ist um so höher, je höher der Prognosetag ist, und zu diesen Zeitpunkten auftretende Überschreitungen werden nicht mitgezählt.

Abbildung 31 zeigt ergänzend zu Tabelle 11 die Box-Whisker-Plots der Hit Rate für alle drei Prognosetage, links für die unkorrigierten und rechts für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten PM₁₀-Prognosen der Tagesmittelwerte an den Spot-Stationen. Im Median wurden 2016 ebenso wie 2019 fünf Überschreitungen des Schwellenwertes von $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ beobachtet, im Maximum traten 2016 25 Überschreitungen auf (an der Station DENW208 Gelsenkirchen Kurt-Schumacher-Straße). Die unkorrigierten CAMS-Prognosen erfassen wie schon 2019 (Abbildung 26) nur an wenigen Stationen überhaupt eine Überschreitung. Die maximale Hit Rate liegt an den ersten beiden Prognosetagen bei knapp 8 % und betrifft eine von 13 Überschreitungen an der Station DERP041 Ludwigshafen-Heinigstraße. Am dritten Prognosetag steigt die maximale Hit Rate auf rund 33 %, die sich auf eine von drei Überschreitungen an der Station DEHE040 Darmstadt-Hügelstraße bezieht.

Durch die Korrektur mit der Hybrid-Vorhersage erhöht sich die Anzahl der durch die Prognose erfassten Überschreitungen an allen drei Prognosetagen deutlich. So werden am 1. Prognosetag

an rund 65 % und am 3. Prognosetag noch an knapp 50 % der betrachteten Spot-Stationen Überschreitungen erfasst. Die Hit Rate liegt damit am 1. Prognosetag im Median bei 33 %, das obere Quartil beträgt 50% und das Maximum 100 %. An der Station DENW208 werden durch die korrigierten Prognosen 13 der 25 beobachteten Überschreitungen erfasst. Am 2. Prognosetag sinkt der Median der Hit Rate auf knapp 17 %, das obere Quartil liegt bei rund 33 % und das Maximum bei 60%. Am 3. Prognosetag wird im Median keine Überschreitung mehr erfasst, das obere Quartil beträgt knapp 29 % und das Maximum wieder 100 %, welche sich in diesem Fall auf mehrere Stationen beziehen, an denen ein oder zwei beobachtete Überschreitungen durch die Prognosen erfasst werden. An der Station DENW208 werden am 3. Prognosetag durch die korrigierten Prognosen noch 7 der 25 beobachteten Überschreitungen erfasst.

Abbildung 31: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Hit Rate an den Stationsorten über alle Spot-Stationen. 1. bis 3. Prognosetag, Bezugsjahr 2016. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 32 zeigt die mit dem FAIRMODE-DELTA-Tool erzeugten Assessment Target Plots für die PM₁₀-Spot-Stationen für alle drei Prognosetage für das Bezugsjahr 2016, wie bereits bisher links für die unkorrigierten und rechts für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen. Ausgewertet wurden wieder die Tagesmittelwerte.

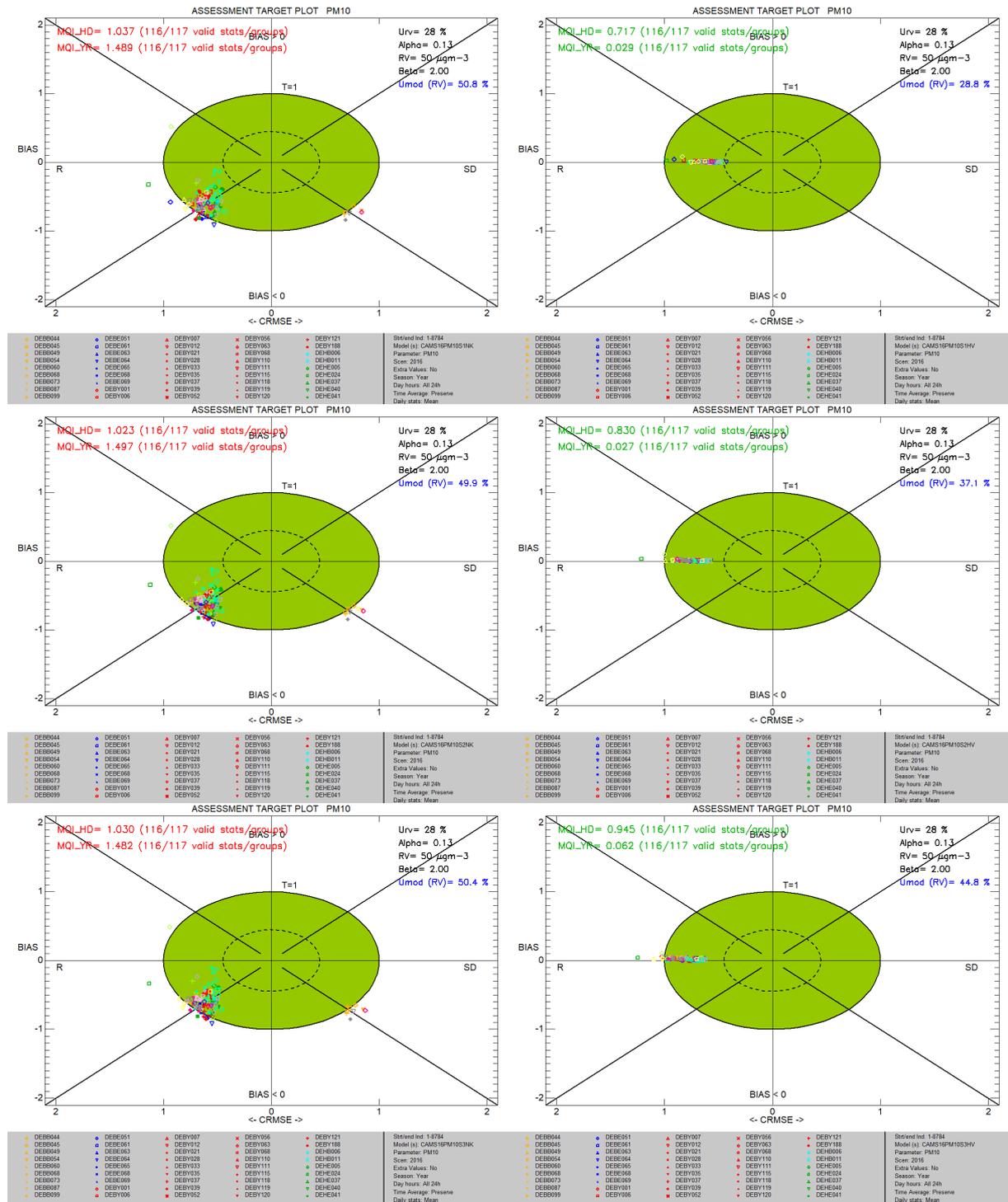
An den Spot-Stationen wird das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO für die unkorrigierten CAMS-Prognosen an keinem der drei Prognosetage erfüllt. Der stundenbezogene Hauptindikator MQI_{HD} liegt an allen drei Prognosetagen knapp über 1, und der auf das Jahr bezogene MQI_{YR} liegt mit Werten zwischen 1.482 und 1.497 deutlich über 1, wobei der Wert am 2. Prognosetag am höchsten ist. Wie bei den Spot- und Area-Stationen 2019 teilen sich die Stationspunkte in zwei Cluster auf. Allerdings befinden sich bei den Spot-Stationen 2016 fast alle Stationen in dem linken Cluster, in dem der Modellfehler durch den Korrelationskoeffizienten (R) dominiert wird, und nur wenige Stationen in dem rechten Cluster, in dem der Modellfehler durch die Standardabweichung (SD) dominiert wird. In beiden Clustern liegen an allen drei Prognosetagen eine ganze Reihe der Stationspunkte außerhalb der grünen Ellipse. Alle Stationspunkte zeigen einen negativen Bias.

Die Korrektur durch die Hybrid-Vorhersage reduziert wie schon zuvor den MQI_{YR} am 1. Prognosetag drastisch von 1.489 auf 0.029, am 2. Prognosetag liegt der MQI_{YR} bei 0.027 und am 3. Prognosetag bei 0.062. Der MQI_{HD} ist nach der Korrektur am 1. Prognosetag mit 0.717 ebenfalls deutlich niedriger als für die unkorrigierten Prognosen, für die ein MQI_{HD} von 1.037 berechnet wurde. Der MQI_{HD} steigt für die korrigierten Prognosen über die Prognosetage an, ist aber am 3. Prognosetag mit 0.945 immer noch niedriger als für die unkorrigierten Prognosen am 1. Prognosetag und ist außerdem kleiner als 1. Damit ist das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO für die korrigierten CAMS-Prognosen für alle drei Prognosetage erfüllt. Auch in diesem Fall liegen alle Stationspunkte sehr dicht an der x-Achse, was auf den bereits im Zusammenhang mit den statistischen Kennwerten diskutierten niedrigen Bias der korrigierten CAMS-Prognosen hinweist. Die Stationspunkte sind weitgehend im Inneren der grünen Ellipse lokalisiert, am 2. und 3. Prognosetag kommen einige wenige Stationspunkte außerhalb der grünen Ellipse zu liegen. Wie bei den Spot- und Area-Stationen 2019 wird der Modellfehler im Unterschied zu den unkorrigierten Prognosen an allen Stationen durch den Korrelationskoeffizienten (R) dominiert. Wie in Abschnitt 7.1 beschrieben, wird davon ausgegangen, dass der Grund dafür in dem zeitlichen Verzug der korrigierten Zeitreihen liegt, der oben insbesondere für kurze Episoden mit hohen Konzentrationswerten beschrieben wurde.

Im Forecast-Modus erfüllen die unkorrigierten CAMS-Prognosen das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO_{Forecast} an keinem der drei Prognose-Tage (Abbildung 33, links). Im Gegensatz zu den Spot- und Area-Stationen 2019 liegen hier an allen drei Prognosetagen ähnlich viele Stationspunkte außerhalb der grünen Ellipse, d. h. sie erfüllen das Kriterium MQI_{Forecast} ≤ 1 nicht. Entsprechend liegt auch das angegebene 90. Perzentil der MQI_{Forecast} aller Stationen an allen drei Prognosetagen deutlich über 1, wobei der niedrigste Wert mit 1.170 wie bisher am 3. Prognosetag auftritt, der höchste Wert mit 1.279 jedoch nicht wie bisher am 1., sondern am 2. Prognosetag. Auffällig ist, dass am 1. Prognosetag alle Stationspunkte auf der linken Seite des Forecast Target Plots lokalisiert sind, dass also an allen Spot-Stationen die Anzahl der Missed Alarms größer ist als die Anzahl der False Alarms, dass aber am 2. und 3. Prognosetag eine ganze Reihe von Stationen auf die rechte Seite des Target Plots hinüberwandern, was eine Umkehr des Verhältnisses von Missed und False Alarms an diesen Stationen bedeutet.

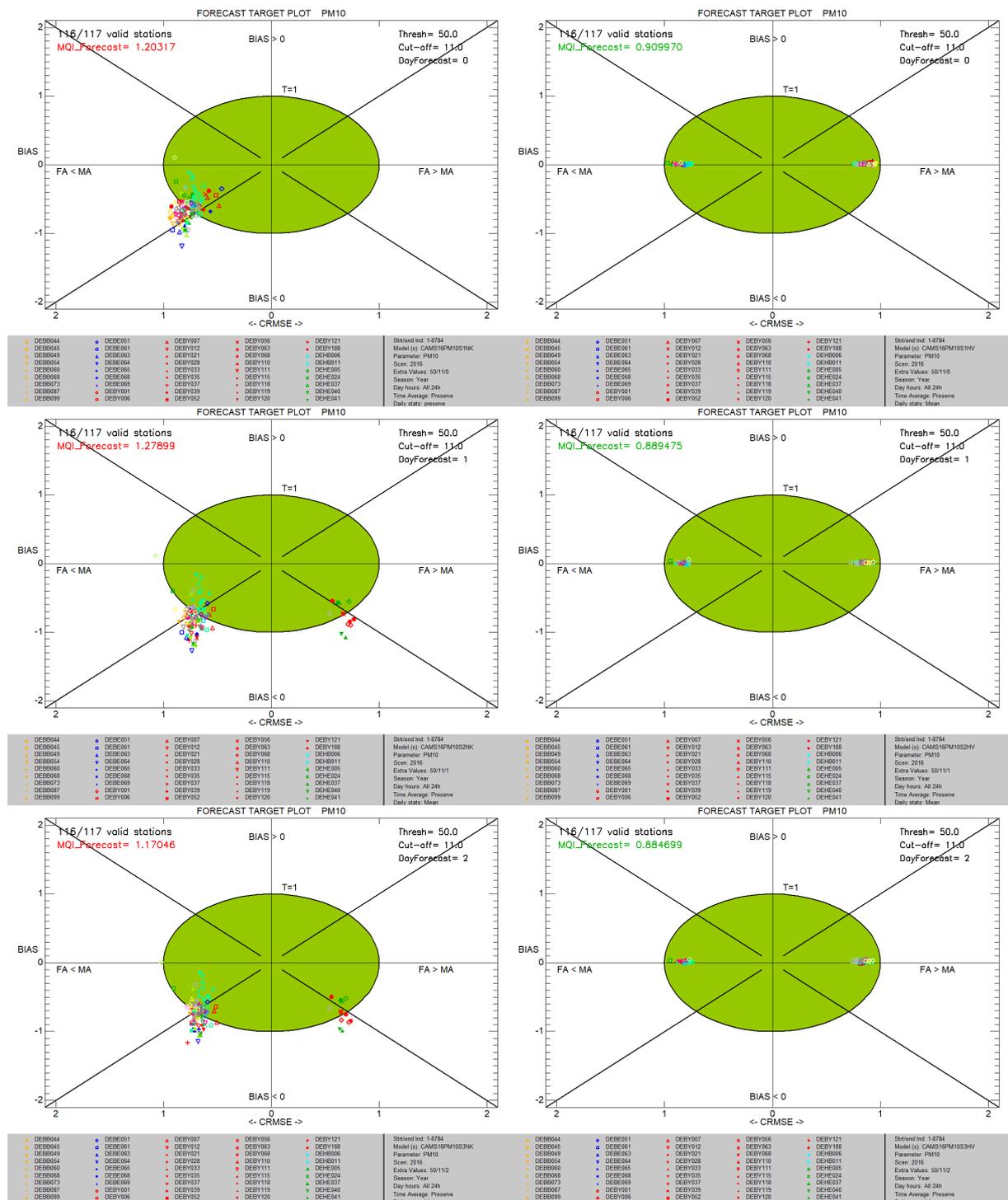
Für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen hingegen liegt das 90. Perzentil der MQI_{Forecast} zwischen 0.910 am 1. Prognosetag und 0.885 am 3. Prognosetag, das MQO_{Forecast} ist somit in allen Fällen erfüllt (Abbildung 33, rechts).

Abbildung 32: Assessment Target Plots PM₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2016, 1. bis 3. Prognosetag



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 33: Forecast Target Plots PM₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2016, 1. bis 3. Prognostag



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 34 ist die dynamische Evaluierung für die Zeitbezüge Tag – Nacht (oben), Sommer – Winter (Mitte) und Wochentag – Wochenende (unten) für die PM₁₀-Spot-Stationen mit Bezugsjahr 2016 dargestellt, jeweils für den 1. Prognostag.

Bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen (Abbildung 34, links) sind analog zu den entsprechenden Auswertungen an den Spot- und Area-Stationen 2019 die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Tag und Nacht im Regelfall negativ, d. h. die modellierten PM₁₀-

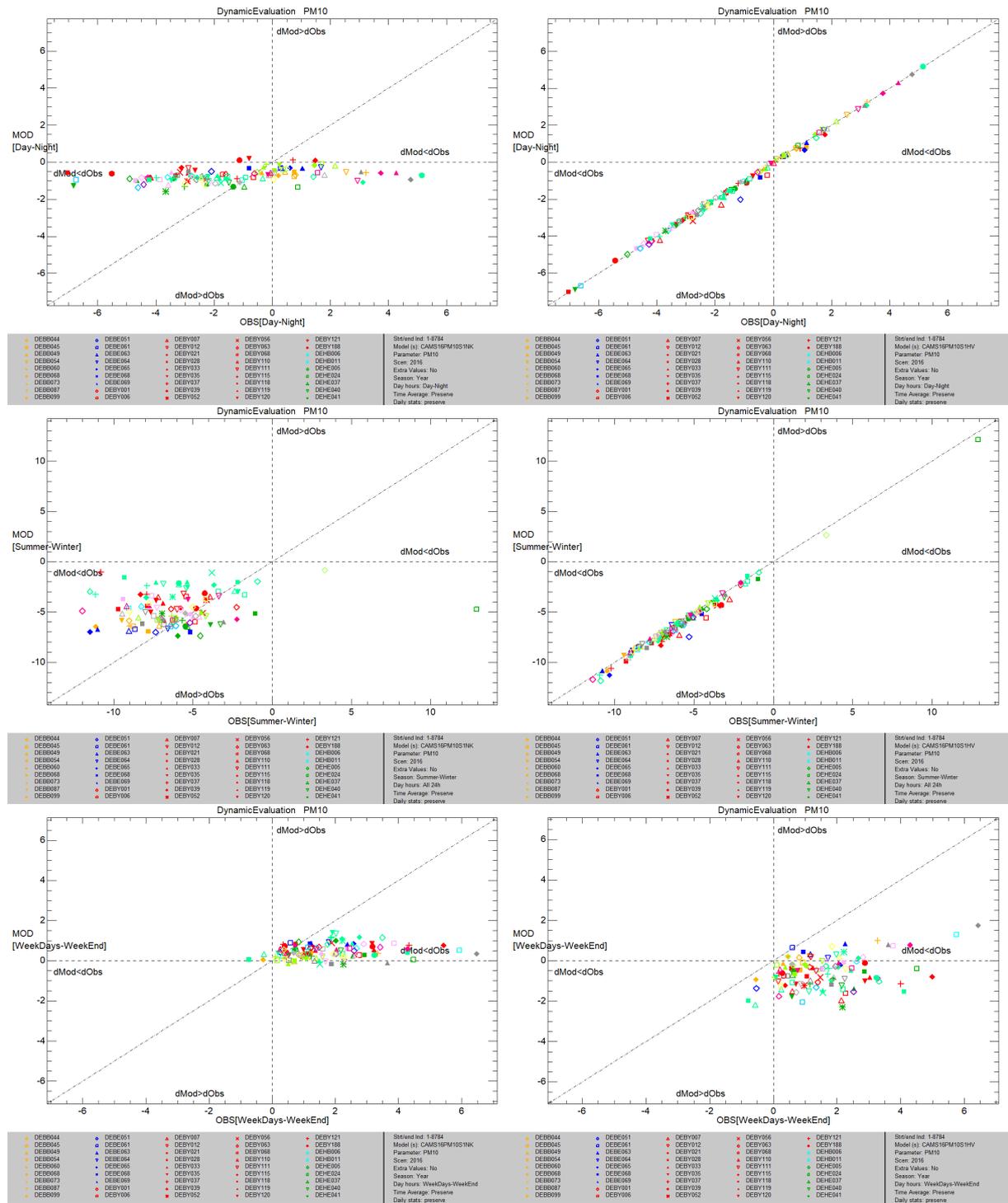
Konzentrationen sind im Mittel nachts höher als tagsüber. Es werden maximal Differenzen von ca. $-2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ erreicht. Die mittleren Differenzen zwischen Tag und Nacht bei den Messwerten erreichen hingegen Werte bis zu $-7 \mu\text{g}/\text{m}^3$ sowie im positiven Bereich bis zu $+6 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Die beobachteten mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht werden demnach auch im Bezugsjahr 2016 an den meisten Fällen nicht korrekt durch die unkorrigierten CAMS-Prognosen wiedergegeben.

Die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Sommer und Winter (Abbildung 34, Mitte) sind für die unkorrigierten CAMS-Prognosen ebenfalls negativ, d. h. die modellierten PM_{10} -Konzentrationen sind im Mittel im Winter höher als im Sommer. Wie bei den Spot-Stationen 2019 sind die mittleren Differenzen bei den Messwerten ebenfalls negativ. Allerdings ergeben sich bei den CAMS-Prognosen Konzentrationsdifferenzen bis zu $-7 \mu\text{g}/\text{m}^3$, während bei den Messwerten Konzentrationsdifferenzen bis zu $-12 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auftreten, und die Stationspunkte sind deutlich stärker gestreut als bei den Tag – Nacht – Konzentrationsdifferenzen.

In beiden Fällen führt die Korrektur der CAMS-Prognosen durch die Hybrid-Vorhersage dazu, dass die prognostizierten mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Tag und Nacht bzw. zwischen Sommer und Winter mit den beobachteten Konzentrationsdifferenzen sehr gut übereinstimmen, so dass die Stationspunkte nah an der 1:1-Diagonalen liegen (Abbildung 34, rechts).

Die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Wochentag und Wochenende sind sowohl für die unkorrigierten CAMS-Prognosen als auch für die Messwerte im Regelfall positiv, d. h. die modellierten bzw. gemessenen PM_{10} -Konzentrationen sind im Mittel unter der Woche höher als am Wochenende. Dabei erreichen die CAMS-Prognosen Konzentrationsdifferenzen von bis zu $+1.5 \mu\text{g}/\text{m}^3$, während die Messdaten Konzentrationsdifferenzen von bis zu $+6.5 \mu\text{g}/\text{m}^3$ erreichen, d. h. auch hier werden die beobachteten mittleren Konzentrationsdifferenzen an den meisten Stationen nicht durch die Prognose erfasst (Abbildung 34, links unten). Analog zu den Spot- und Area-Stationen 2019 führt die Anwendung der Hybrid-Vorhersage an dieser Stelle zu einer Verschlechterung der dynamischen Evaluierung, die sich hier aber nicht nur durch eine stärkere Streuung der Stationspunkte ausdrückt, sondern auch durch eine Verlagerung in den negativen Bereich der modellierten mittleren Konzentrationsdifferenzen (Abbildung 34, rechts unten).

Abbildung 34: Dynamische Evaluierung PM₁₀ Spot-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2016. Oben: Tag – Nacht. Mitte: Sommer – Winter. Unten: Wochentag – Wochenende.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

7.3 NO₂: Area-Stationen, Bezugsjahr 2019

In Tabelle 12 sind die mit der Testumgebung berechneten statistischen Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen für NO₂-Stundenmittelwerte aufgeführt, wie schon für PM₁₀ für alle drei Prognosetage und jeweils als Median über alle entsprechenden statistischen Kennwerte an den betrachteten Spot-Stationen.

Ebenso wie bei PM₁₀ wird der NO₂-Mittelwert von den unkorrigierten CAMS-Prognosen im Median unterschätzt, desgleichen die Standardabweichung. Die Maximalwerte werden von den CAMS-Prognosen ebenfalls unterschätzt, hier werden ca. zwei Drittel der gemessenen Konzentrationen prognostiziert. Die Korrelation liegt bei knapp über 0.6 und damit geringfügig höher als bei PM₁₀. Die Medianwerte werden im Regelfall mit den Prognosetagen minimal schlechter.

Als Schwellenwerte für die NO₂-Stundenmittelwerte wurden 40 µg/m³ und 100 µg/m³ betrachtet, das entspricht im aktuellen Luftqualitätsindex dem Übergang zwischen den Klassen „gut“ und „mäßig“ bzw. „mäßig“ und „schlecht“. Während für den Schwellenwert von 40 µg/m³ im Jahr 2019 im Median 290 gemessene Überschreitungen an den Area-Stationen gezählt wurden, wurde der Schwellenwert von 100 µg/m³ an den Area-Stationen im Median nicht überschritten. Von den 290 Überschreitungen von 40 µg/m³ wurden im Median zwischen 4.4 % (1. Prognosetag) und 2.5 % (3. Prognosetag) durch die unkorrigierten CAMS-Prognosen erfasst. Die FAR liegt dabei im Median deutlich unter 1 %. Für den Schwellenwert von 100 µg/m³ liegt die FAR im Median bei 0.0 %.

Durch die Hybrid-Vorhersage wird wie schon bei PM₁₀ der Bias effektiv korrigiert. Mittelwerte und Standardabweichungen der korrigierten CAMS-Prognosen entsprechen im Median weitgehend denen der Messwerte, und sowohl der BIAS als auch der MFB liegen deutlich niedriger als bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen. Die Maximalwerte werden hier leicht überschätzt. Der Korrelationskoeffizient ist ebenfalls wie bei PM₁₀ im Median für die korrigierten CAMS-Prognosen niedriger als für die unkorrigierten CAMS-Prognosen. Der FGE ist im Gegensatz zu den PM₁₀-Area-Stationen niedriger als bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen. Bei den korrigierten Prognosen ist auch im vorliegenden Fall zu beobachten, dass der Korrelationskoeffizient über die Prognosetage im Median stärker abnimmt und RMSE und FGE stärker zunehmen als bei den unkorrigierten Prognosen.

Die Hit Rate für den Schwellenwert 40 µg/m³ ist für die korrigierten CAMS-Prognosen mit Werten zwischen 36.7 % (1. Prognosetag) und 24 % (3. Prognosetag) deutlich höher als für die unkorrigierten CAMS-Prognosen. Die FAR liegt dabei für alle drei Prognosetage bei rund 2.7 %. Für den Schwellenwert von 100 µg/m³ liegt die FAR bei 0.0 %.

Tabelle 12: NO₂-Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle Area-Stationen, 2019

Metrik	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS
	PT1	PT2	PT3	HV PT1	HV PT2	HV PT3
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.99	0.99	0.99	0.99	0.99	0.99
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.75	0.75	0.74	0.00	0.00	0.00
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	14.65	14.68	14.70	14.68	14.70	14.73
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	8.34	8.30	8.21	14.74	14.80	14.82
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	79.86	79.86	79.86	79.86	79.86	79.66
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	53.17	51.57	52.27	86.33	86.71	85.00
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	10.73	10.74	10.74	10.74	10.75	10.76
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	6.61	6.48	6.41	10.96	10.96	10.98
Korrelation [-]	0.64	0.63	0.61	0.61	0.53	0.48
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	10.32	10.40	10.58	9.75	10.55	11.02
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-4.67	-4.73	-4.78	0.04	0.09	0.09
MFB [%]	-39.18	-39.63	-40.00	-3.23	-3.29	-3.41
FGE [%]	57.47	58.11	58.61	47.59	52.47	54.73
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	290	290	290	289	289	288
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	4.38	3.41	2.51	36.72	29.97	23.98
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	0.14	0.14	0.09	2.69	2.75	2.75
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	0	0	0	0	0	0
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

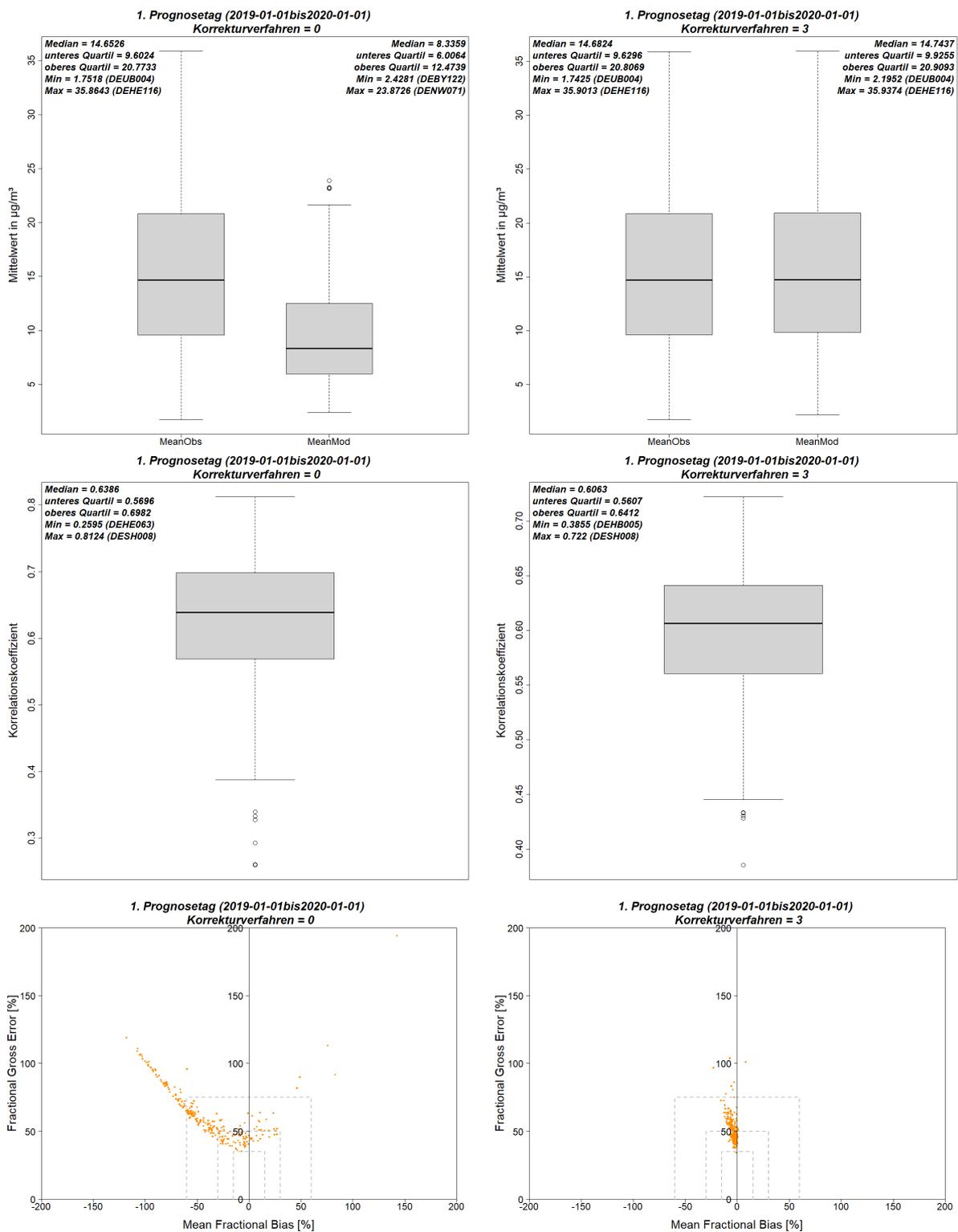
In Abbildung 35 sind die Box-Whisker-Plots für Mittelwerte und Korrelationskoeffizienten sowie die Soccer-Plots zusammengestellt, links für die unkorrigierten und rechts für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten NO₂-Prognosen der Stundenmittelwerte, jeweils für den ersten Prognosetag.

Die Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (Abbildung 35, oben) zeigen analog zu PM₁₀ (Abbildung 15, oben) die effektive Biaskorrektur der prognostizierten NO₂-Stundenmittelwerte durch die Hybrid-Vorhersage, die über die gesamte Spannbreite des betrachteten Stationskollektivs zum Tragen kommt. In den Box-Whisker-Plots der Korrelationskoeffizienten (Abbildung 35, Mitte) ist zu erkennen, dass der Korrelationskoeffizient bezüglich der Stundenmittelwerte durch die Hybrid-Vorhersage insbesondere bei den höheren Werten (Maximum, oberes Quartil) sowie im Median gegenüber den unkorrigierten CAMS-Prognosen abnimmt, während das untere Quartil

für korrigierte und unkorrigierte Prognosen fast gleich ist und der Minimalwert für die korrigierten Prognosen höher liegt.

Im Soccer-Plot für die unkorrigierten CAMS-Prognosen zeigen die meisten Messorte wie schon bei PM_{10} einen negativen MFB, eine geringere Anzahl Messorte weist auch einen positiven MFB auf (Abbildung 35, unten links). Die lineare Gruppierung der Stationspunkte deutet darauf hin, dass bei den NO_2 -Stundenmittelwerten an den Area-Stationen im Gegensatz zu PM_{10} eher systematische Fehler in den CAMS-Prognosedaten dominieren. Nach Korrektur mit der Hybrid-Vorhersage liegen die Stationspunkte nahe an der y-Achse, d. h. der MFB geht an allen Stationen deutlich zurück, wobei der Schwerpunkt der Stationspunkte weiterhin im negativen Bereich des MFB liegt.

Abbildung 35: NO₂-Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (oben) und Korrelationskoeffizienten (Mitte) an den Stationsorten sowie Soccer Plots (unten) über alle Area-Stationen, 1. Prognostag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



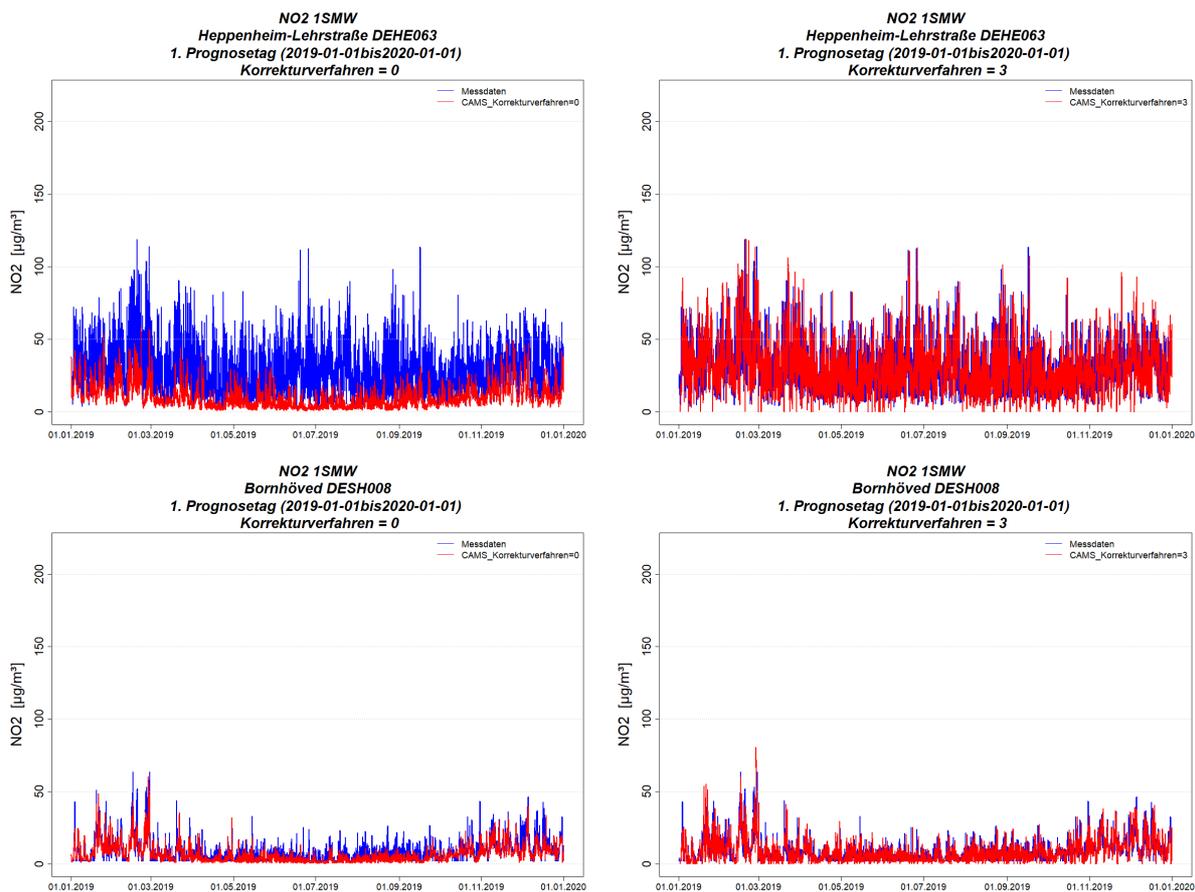
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 36 sind beispielhaft die Zeitreihen der NO₂-Stundenmittelwerte 2019 für die Station mit dem niedrigsten (oben, Station DEHE063 Heppenheim-Lehrstraße) und mit dem

höchsten (unten, Station DESH008 Bornhöved) Korrelationskoeffizienten der unkorrigierten CAMS-Prognosen abgebildet. Links sind dabei wie schon bisher die Zeitreihen der unkorrigierten und rechts die Zeitreihen der korrigierten CAMS-Prognosen dargestellt.

Anhand der Stundenmittelwert-Zeitreihen für das ganze Jahr 2019 ist zunächst einmal nur zu erkennen, dass die unkorrigierten Prognosen die Messwerte im Regelfall unterschätzen, und dies an der Station DEHE063 deutlich stärker als an der Station DESH008. DEHE063 ist eine als Area-Station klassifizierte Messstation, die verkehrlich beeinflusst ist, wohingegen DESH008 eine ländlich-regionale Hintergrund-Station ist. Die Korrektur der CAMS-Prognosen durch die Hybrid-Vorhersage führt an beiden Stationen zu einer deutlich besseren Erfassung der Zeitreihe und ihrer Maximalwerte, wobei es auch immer wieder zu Überschätzungen der gemessenen Spitzenwerte durch die korrigierten CAMS-Prognosen kommt.

Abbildung 36: NO₂-Stundenmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



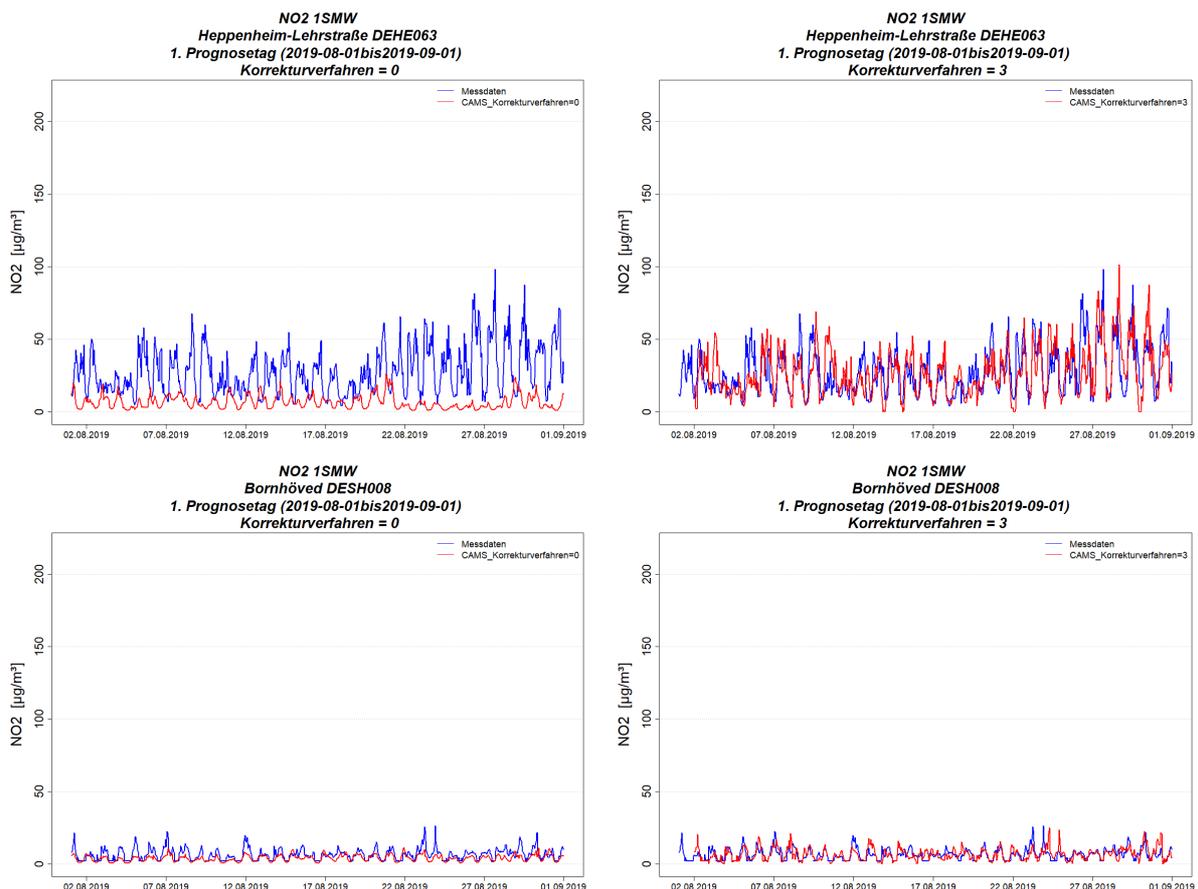
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Eine genauere Betrachtung der Zeitreihen am Beispiel des Monats August 2019 (Abbildung 37) zeigt, dass an der Station DEHE063 die unkorrigierten CAMS-Prognosen den gemessenen Tagesgang der NO₂-Konzentration nicht abbilden können. Die Prognosen beschreiben für den Bereich der Messstation DEHE063 eher den großräumigen Hintergrund, wohingegen die Messung eher den Verlauf einer verkehrsbezogenen Messstation aufweist. Dies erklärt auch den niedrigen Korrelationskoeffizienten von 0.26 zwischen Messung und unkorrigierter CAMS-Prognose an dieser Station. An der ländlichen Hintergrund-Station DESH008, für die ein Korrelations-

koeffizient von 0.81 berechnet wurde, stimmen die Tagesgänge von Messung und unkorrigierter CAMS-Prognose deutlich besser überein. Allerdings werden auch hier Konzentrationsspitzen von den CAMS-Prognosen häufig nicht erreicht.

Durch die Anwendung der Hybrid-Vorhersage wird der Tagesgang an der Station DEHE063 deutlich besser erfasst, der Korrelationskoeffizient erhöht sich auf 0.54. An der Station DEHE008 ergibt sich durch die Korrektur v. a. eine bessere Erfassung der Konzentrationsspitzen. Wie schon bei PM₁₀ beschrieben (Abschnitt 7.1), tritt jedoch durch die Korrektur ein zeitlicher Verzug von einem Tag auf, mit dem gemessene Konzentrationsspitzen an das korrigierte Modell weitergereicht werden. Dies führt auch bei NO₂ im Nachlauf von Tagen oder Episoden mit höheren Konzentrationen zu der Überschätzung einzelner Konzentrationsspitzen. Im Fall der Station DEHE008 verringert sich der Korrelationskoeffizient dadurch auf 0.72.

Abbildung 37: NO₂-Stundenmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosetag, Zeitraum August 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.

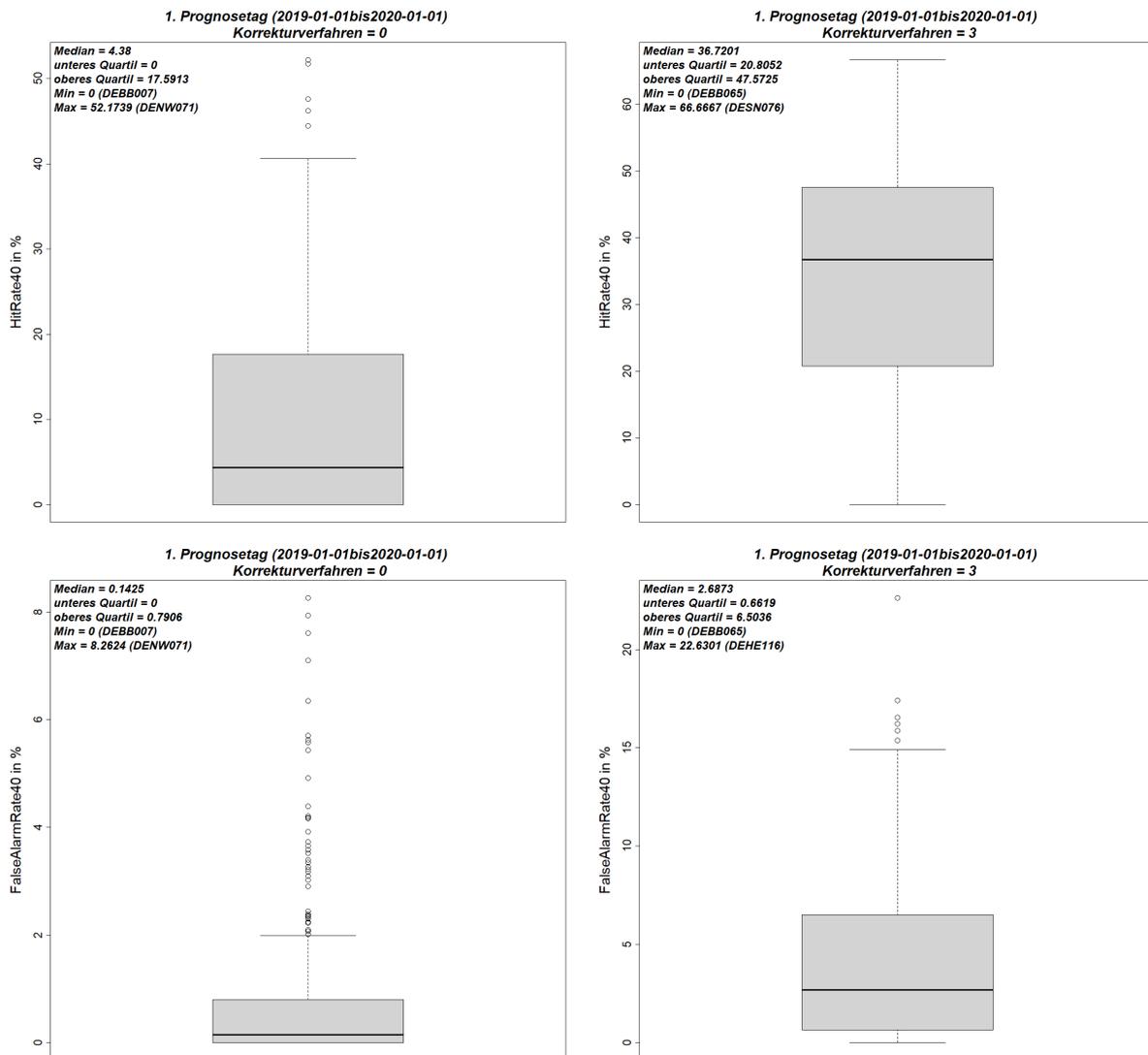


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 38 zeigt die Box-Whisker-Plots der Hit Rate und der FAR für die NO₂-Stundenmittelwerte bei einem Schwellenwert von 40 µg/m³, jeweils für den ersten Prognosetag. Im Median wurden im Jahr 2019 290 Überschreitungen des Schwellenwertes von 40 µg/m³ beobachtet, im Maximum traten 3176 Überschreitungen auf (an der Station DEHE116 Offenbach-Untere Grenzstraße, einer verkehrlich beeinflussten Area-Station).

Für die unkorrigierten CAMS-Prognosen ergibt sich im Median eine Hit Rate von 4.4 %, im Maximum wird eine Hit Rate von 52.2 % erreicht, und zwar an der Station DENW071 Düsseldorf-Lörick. Entsprechend der niedrigen Hit Rate ist auch die FAR sehr niedrig, sie liegt im Median bei 0.14 % und im oberen Quartil bei 0.79 %. Der Maximalwert ergibt sich mit 8.3 % für die Station mit der höchsten Hit Rate, DENW071. Durch die Korrektur der CAMS-Prognosen mit der Hybrid-Vorhersage erhöht sich die Hit Rate im Median auf 36.7 %, das untere Quartil steigt von 0 % auf 20.8 %, und das Maximum wird an der Station DESN076 Collnberg mit 66.7 % erreicht, an der allerdings im Jahr 2019 nur 3 Überschreitungen beobachtet wurden. Für die FAR ergibt sich bei den korrigierten CAMS-Prognosen ein Median von knapp 2.7 %, ein oberes Quartil von 6.5 % und ein Maximalwert von 22.6 %, letzterer an der Station mit den meisten beobachteten Überschreitungen von 40 µg/m³ im Jahr 2019, DEHE116.

Abbildung 38: NO₂-Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Hit Rate (oben) und der False Alarm Rate (unten) an den Stationsorten über alle Area-Stationen bei einem Schwellenwert von 40 µg/m³. 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



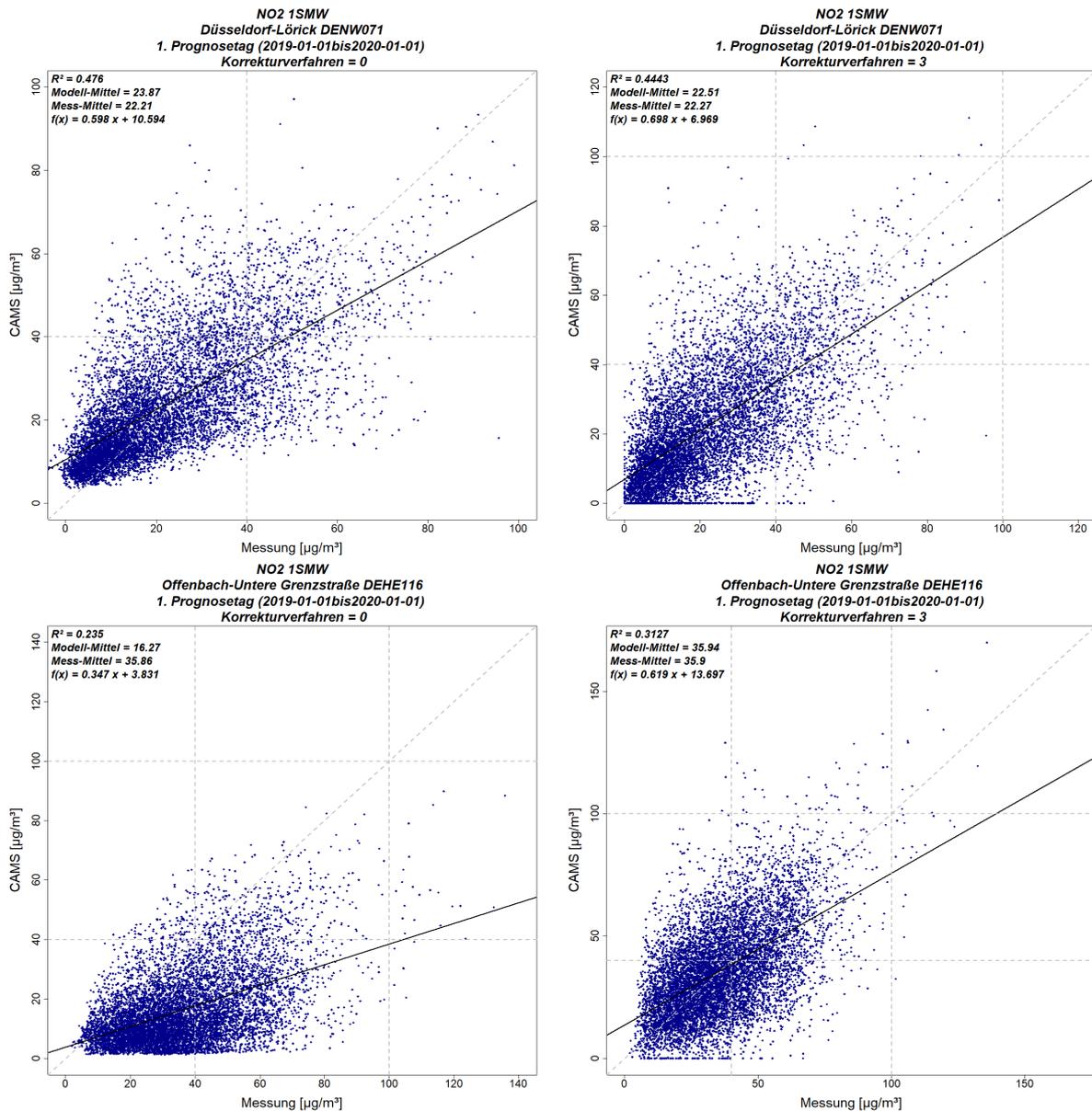
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 39 sind beispielhaft die Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte für zwei Stationen dargestellt, von denen die eine die maximale Hit Rate von 52.2 % bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen aufweist (DENW071 Düsseldorf-Lörick, oben) und die andere die maximale Anzahl von beobachteten Überschreitungen des Schwellenwertes von 40 µg/m³ (3176 Überschreitungen, DEHE116 Offenbach-Untere Grenzstraße, unten) und gleichzeitig eine hohe Hit Rate von 60.8 % bei den korrigierten CAMS-Prognosen.

Für die Station DENW071 steigt die Hit Rate durch die Anwendung der Hybrid-Vorhersage nur wenig von 52.2 % auf 55.5 %, die FAR steigt geringfügig von 8.3 % auf 8.8 %. Der Mittelwert der Messdaten, der durch das unkorrigierte Modell leicht überschätzt wird, wird durch die korrigierten Prognosen gut wiedergegeben. Das Bestimmtheitsmaß für diese Station geht durch die Korrektur von knapp 0.48 auf 0.44 zurück.

Für die Station DEHE116 erhöhen sich Hit Rate und FAR durch die Hybrid-Vorhersage deutlich. Die Hit Rate steigt von 14.0 % auf 60.8 % und die FAR von 1.8 % auf 22.6 % an. Durch die Korrektur wird zudem der Mittelwert der Prognosedaten auf den Mittelwert der Messdaten angehoben, und das Bestimmtheitsmaß verbessert sich von 0.24 auf 0.31.

Abbildung 39: NO₂-Stundenmittelwerte: Scatterplots mit hohen Werten für die Hit Rate im Original (oben) bzw. in den korrigierten CAMS-Prognosen (unten). 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 40 zeigt die mit dem FAIRMODE-DELTA-Tool erzeugten Assessment Target Plots für die NO₂-Area-Stationen für alle drei Prognosetage, wie bereits bisher links für die unkorrigierten und rechts für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen. Ausgewertet wurden die NO₂-Stundenmittelwerte.

Für die unkorrigierten CAMS-Prognosen befinden sich die Stationspunkte bis auf wenige Ausnahmen innerhalb der grünen Ellipse. Dabei teilen sich die Stationspunkte wie bei den PM₁₀-Area-Stationen in Abschnitt 7.1 in zwei Cluster auf. Für den größeren Teil der Stationen wird der Modellfehler durch den Korrelationskoeffizienten dominiert (R, linke Hälfte des Target Plots) und für den kleineren Teil durch die Standardabweichung (SD, rechte Hälfte des Target Plots). Der stundenbezogene MQI_{HD} ist für alle drei Prognosetage kleiner als 1 und steigt mit Werten

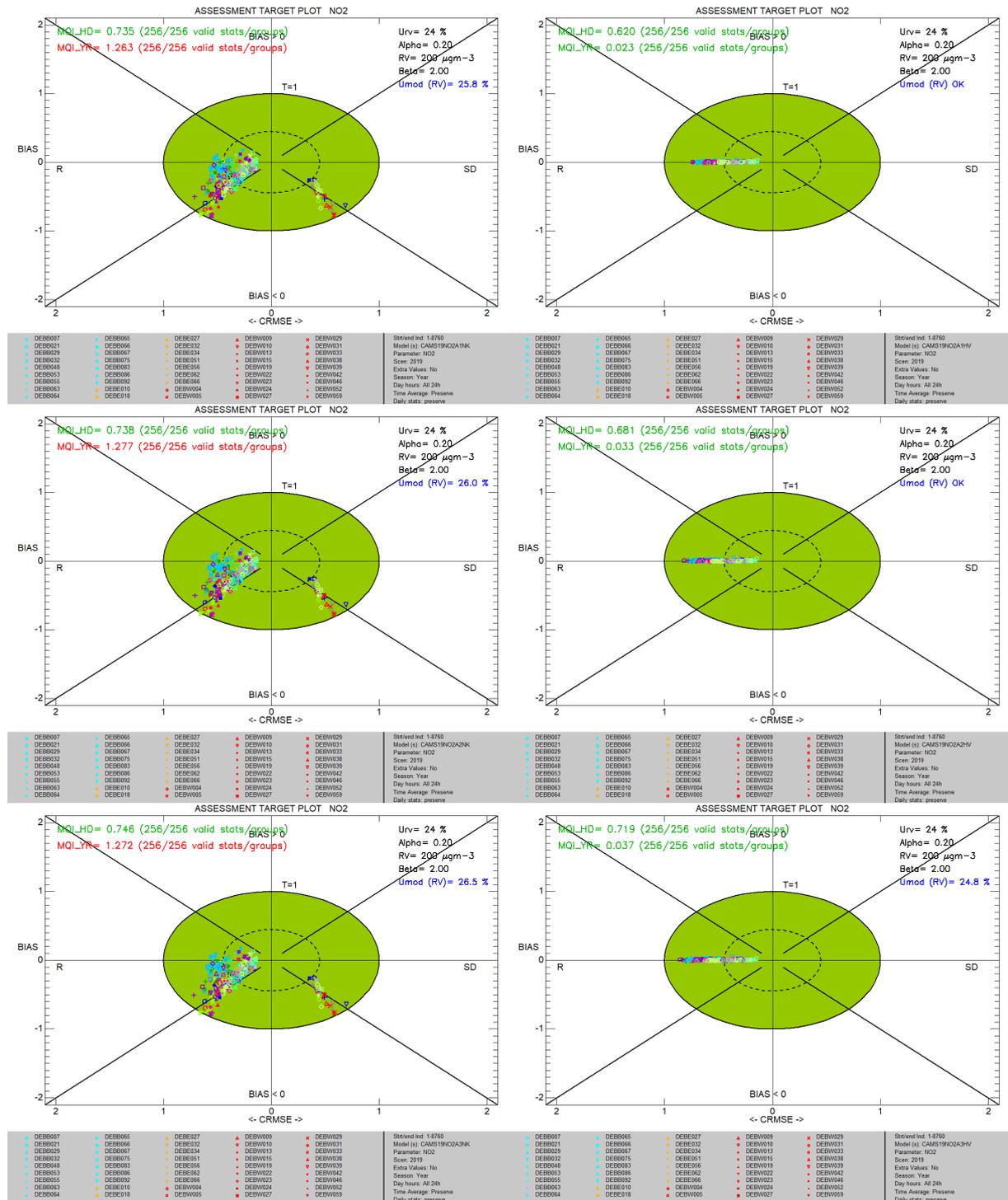
zwischen 0.735 am 1. Prognosetag und 0.746 am 3. Prognosetag auch nur geringfügig über die Prognosetage an. Der MQI_YR hingegen liegt mit Werten zwischen 1.263 und 1.272 deutlich über 1. Da der MQI_HD den Hauptindikator für die Auswertung darstellt, gilt das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO für alle drei Prognosetage als erfüllt.

Die Korrektur durch die Hybrid-Vorhersage reduziert den MQI_YR wie schon bei PM₁₀ drastisch von 1.263 auf 0.023 am 1. Prognosetag, der MQI_YR steigt auch bis zum 3. Prognosetag nur geringfügig auf 0.037 an. Der MQI_HD ist nach der Korrektur am 1. Prognosetag mit 0.630 ebenfalls deutlich niedriger als für die unkorrigierten Prognosen. Der MQI_HD steigt für die korrigierten Prognosen über die Prognosetage an, ist aber am 3. Prognosetag mit 0.719 immer noch niedriger als für die unkorrigierten Prognosen am 1. Prognosetag. Das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO ist damit auch für die korrigierten CAMS-Prognosen für alle drei Prognosetage erfüllt. Wie bei den bisherigen Auswertungen liegen auch für die NO₂-Area-Stationen alle Stationspunkte sehr dicht an der x-Achse, was noch einmal den geringen Bias der korrigierten CAMS-Prognosen zeigt. Analog zu PM₁₀ wird der Modellfehler im Unterschied zu den unkorrigierten Prognosen an allen Stationen durch den Korrelationskoeffizienten (R) dominiert. Wie in Abschnitt 7.1 ausgeführt, wird davon ausgegangen, dass der Grund dafür in dem zeitlichen Verzug der korrigierten Zeitreihen liegt, der anhand der exemplarischen Zeitreihenbetrachtungen (Abbildung 37) auch für NO₂ beschrieben wurde.

Im Forecast-Modus erfüllen die unkorrigierten CAMS-Prognosen wie bei PM₁₀ das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO_Forecast an keinem der drei Prognose-Tage (Abbildung 41, links). An allen drei Prognosetagen liegen viele Stationspunkte außerhalb der grünen Ellipse, d. h. sie erfüllen das Kriterium MQI_Forecast ≤ 1 nicht. Entsprechend liegt auch das angegebene 90. Perzentil der MQI_Forecast aller Stationen mit 1.344 am 1. Prognosetag und 1.165 am 3. Prognosetag deutlich über 1. Gemäß Abschnitt 5.2 ist damit das persistente Modell an allen drei Prognosetagen besser als die unkorrigierte CAMS-Prognose. Auffällig ist, dass im Gegensatz zu PM₁₀ alle Stationspunkte auf der rechten Seite des Forecast Target Plots lokalisiert sind, dass also bei NO₂ an allen Area-Stationen die Anzahl der False Alarms größer ist als die Anzahl der Missed Alarms.

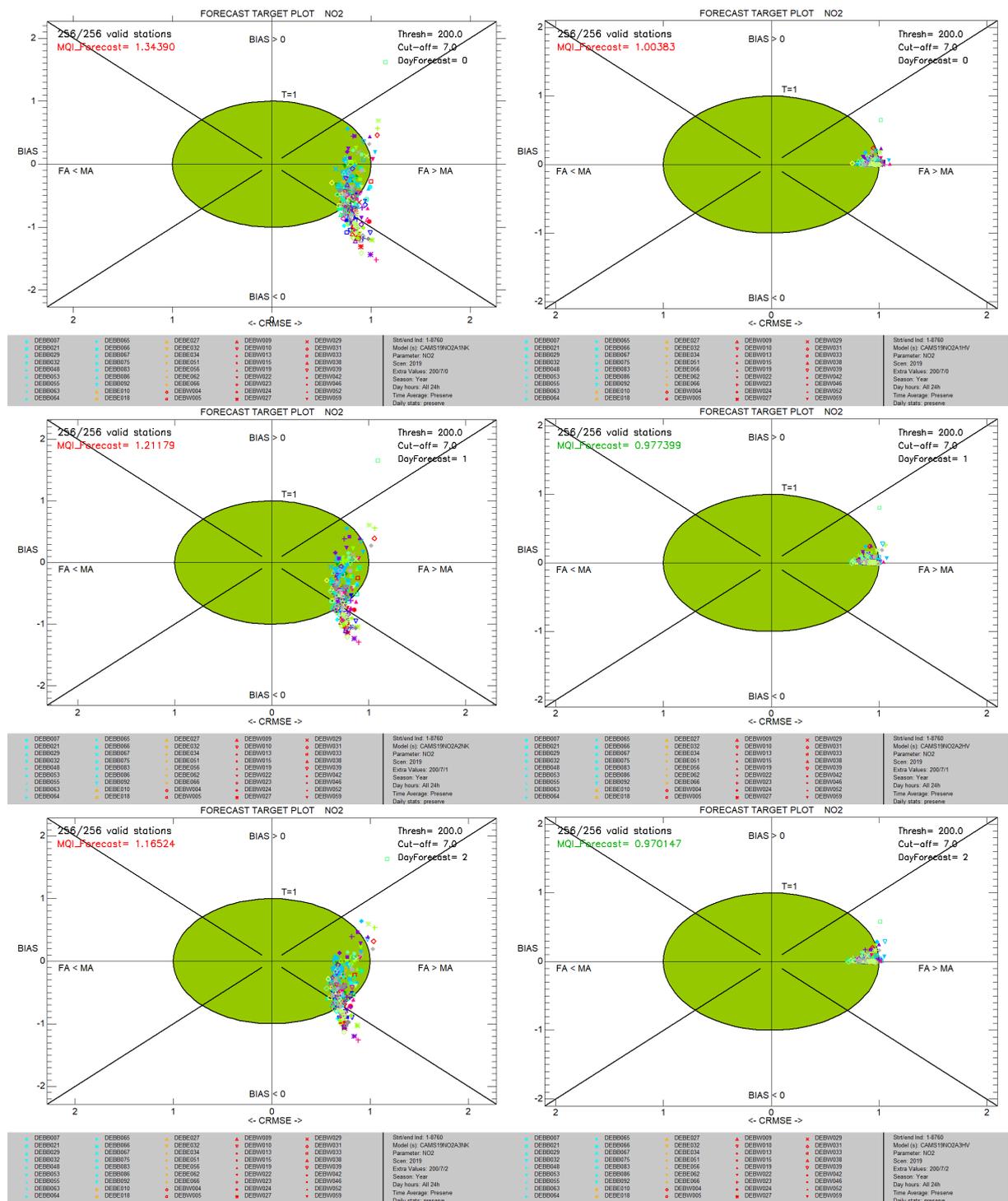
Für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen liegt das 90. Perzentil der MQI_Forecast am 1. Prognosetag mit 1.004 ganz knapp über 1, am 2. und 3. Prognosetag hingegen mit 0.977 und 0.970 knapp unter 1 (Abbildung 41, rechts). Für die korrigierten CAMS-Prognosen ist demnach das MQO_Forecast am 2. und 3. Prognosetag erfüllt, am 1. Prognosetag gerade eben nicht.

Abbildung 40: Assessment Target Plots NO₂ Area-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognostetag



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 41: Forecast Target Plots NO₂ Area-Stationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognostetag



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 42 ist die dynamische Evaluierung für die Zeitbezüge Tag – Nacht (oben), Sommer – Winter (Mitte) und Wochentag – Wochenende (unten) für die NO₂-Area-Stationen dargestellt, jeweils für den 1. Prognostetag.

Bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen (Abbildung 42, links) sind die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Tag und Nacht ausschließlich negativ, d. h. die modellierten NO₂-Konzentrationen sind an allen Area-Stationen im Mittel nachts höher als tagsüber. Dies

entspricht eher einem ländlich-regionalen Regime (siehe z. B. IVU Umwelt, laufend). Es werden maximale Differenzen von ca. $-10\mu\text{g}/\text{m}^3$ erreicht, was den negativen mittleren Differenzen zwischen Tag und Nacht bei den Messwerten mit maximal ca. $-13\mu\text{g}/\text{m}^3$ schon recht nahekommt. Allerdings ist die Streuung der Stationspunkte relativ stark. Zudem weisen die Messwerte an einer ganzen Reihe von Stationen auch mittlere Differenzen im positiven Bereich bis zu $+11\mu\text{g}/\text{m}^3$ auf. Die beobachteten mittleren Differenzen zwischen Tag und Nacht werden demnach durch die unkorrigierten CAMS-Prognosen auch für NO_2 an den meisten Stationen nicht korrekt wiedergegeben. Das Gleiche gilt prinzipiell auch für die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Sommer und Winter, auch wenn hier keine positiven mittleren Differenzen bei den Messwerten beobachtet werden. In beiden Fällen führt die Korrektur der CAMS-Prognosen durch die Hybrid-Vorhersage dazu, dass die prognostizierten mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Tag und Nacht bzw. zwischen Sommer und Winter mit den beobachteten Differenzen sehr gut übereinstimmen, so dass die Stationspunkte sehr nah entlang der 1:1-Diagonalen verteilt sind (Abbildung 42, rechts).

Die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Wochentag und Wochenende sind sowohl für die unkorrigierten CAMS-Prognosen als auch für die Messwerte im Regelfall positiv, d. h. die modellierten bzw. gemessenen NO_2 -Konzentrationen sind im Mittel unter der Woche höher als am Wochenende. Allerdings sind die Stationspunkte zwischen der 1:1-Diagonalen und dem positiven Ast der x-Achse lokalisiert, d. h. die mittleren Differenzen der Messwerte werden im Regelfall durch die CAMS-Prognosen unterschätzt (Abbildung 42, links unten). Im Gegensatz zu den oben betrachteten Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht sowie zwischen Sommer und Winter führt die Anwendung der Hybrid-Vorhersage bei den Konzentrationsdifferenzen zwischen Wochentag und Wochenende tendenziell eher zu einer noch stärkeren Streuung der Stationspunkte und damit zu einer Verschlechterung bei der dynamischen Evaluierung (Abbildung 42, rechts unten).

7.4 NO₂: Verkehrsstationen, Bezugsjahr 2019

Die Untersuchungen in Abschnitt 8 haben gezeigt, dass die dort diskutierte Wochentagskorrektur und auch die in Abschnitt 9 untersuchte Feiertagskorrektur vor allem für NO₂ an verkehrsnahen Messstationen zu einer Verbesserung der Prognosegüte führen. Aus diesem Grund werden die grundlegenden Untersuchungen zur Prognosegüte der reinen CAMS-Prognosen und der nur mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen hier für NO₂ für das Kollektiv derjenigen Spot-Stationen vorgestellt, die gleichzeitig nach EoI (EG, 1997) als „Verkehrsstationen“ klassifiziert sind. Dabei handelt es sich um 122 der in Abschnitt 3.1 aufgeführten 150 Spot-Stationen für NO₂.

In Tabelle 13 sind die mit der Testumgebung berechneten statistischen Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen für NO₂-Stundenmittelwerte aufgeführt, wie bisher für alle drei Prognosetage und jeweils als Median über alle entsprechenden statistischen Kennwerte an den betrachteten verkehrsnahen Messstationen.

Demnach liegen Mittelwert, Maximalwert und Standardabweichung der unkorrigierten CAMS-Prognosen an den verkehrsnahen Stationen im Median etwas höher als an den Area-Stationen (vgl. Tabelle 12). Die entsprechenden Kennwerte der gemessenen Konzentrationen sind aber an den verkehrsnahen Stationen deutlich höher als an den Area-Stationen, so dass z. B. die modellierten Mittelwerte im Median nur noch knapp 30 % der Mittelwerte der Messwerte und die modellierten Maximalwerte im Median nur noch knapp 44 % der gemessenen Maximalwerte erreichen. Die Korrelation liegt mit Werten zwischen 0.39 (1. Prognosetag) und 0.36 (3. Prognosetag) an den Verkehrsstationen im Median deutlich niedriger als an den Area-Stationen. Die Medianwerte werden im Regelfall mit den Prognosetagen minimal schlechter.

An den Verkehrsstationen wurden im Jahr 2019 im Median 2830 gemessene Überschreitungen des Schwellenwerts von 40 µg/m³ gezählt und 24 gemessene Überschreitungen des Schwellenwerts von 100 µg/m³. Von den 2830 Überschreitungen von 40 µg/m³ wurden im Median zwischen 2.2 % (1. Prognosetag) und 1.5 % (3. Prognosetag) durch die unkorrigierten CAMS-Prognosen erfasst. Die FAR liegt dabei im Median deutlich unter 1 %. Für den Schwellenwert von 100 µg/m³ liegt der Median von Hit Rate und FAR bei 0.0 %.

Durch die Hybrid-Vorhersage wird wie bisher der Bias effektiv korrigiert. Mittelwerte und Standardabweichungen der korrigierten CAMS-Prognosen entsprechen im Median weitgehend denen der Messwerte, und sowohl der BIAS als auch der MFB liegen nahe bei Null. Die Maximalwerte werden im Median je nach Prognosetag leicht unter- oder überschätzt. Der Korrelationskoeffizient ist mit Werten zwischen 0.55 und 0.37 im Median für die korrigierten CAMS-Prognosen höher als für die unkorrigierten CAMS-Prognosen. Der FGE ist an allen drei Prognosetage im Median deutlich niedriger als bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen. Bei den korrigierten Prognosen ist wie bisher zu beobachten, dass der Korrelationskoeffizient über die Prognosetage im Median stärker abnimmt und RMSE und FGE stärker zunehmen als bei den unkorrigierten Prognosen.

Die Hit Rate für den Schwellenwert 40 µg/m³ ist für die korrigierten CAMS-Prognosen mit Werten zwischen knapp 60 % (1. Prognosetag) und 51.4 % (3. Prognosetag) im Median deutlich höher als für die unkorrigierten CAMS-Prognosen. Die FAR liegt dabei im Median zwischen 20.6 % und 25.5 % und damit deutlich höher als bei den NO₂-Area-Stationen. Für den Schwellenwert von 100 µg/m³ ergibt sich im Median eine Hit Rate zwischen knapp 20 % am 1. Prognosetag und knapp 9 % am 3. Prognosetag, die FAR liegt dabei im Median bei knapp 0.3 %.

Tabelle 13: NO₂-Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die unkorrigierten und die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS bzw. CAMS HV), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle verkehrsnahen Stationen, 2019

Metrik	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS	CAMS
	PT1	PT2	PT3	HV PT1	HV PT2	HV PT3
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	1.13	1.12	1.12	0.00	0.00	0.00
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	34.24	34.27	34.27	34.25	34.24	34.29
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	10.28	10.16	10.14	34.25	34.31	34.36
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	133.08	133.08	133.08	133.08	133.08	132.00
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	59.01	58.37	56.92	132.86	137.52	135.18
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.94	17.94	17.93	17.93	17.95	17.93
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	7.76	7.54	7.53	18.29	18.27	18.10
Korrelation [-]	0.39	0.38	0.36	0.55	0.42	0.37
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	27.23	27.47	27.57	17.11	19.27	20.13
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-21.42	-21.51	-21.56	-0.01	0.06	0.05
MFB [%]	-100.80	-101.45	-101.31	-0.69	-0.53	-0.46
FGE [%]	101.99	102.59	102.52	40.34	45.58	46.88
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	2830	2830	2829	2786	2777	2765
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	2.19	1.98	1.54	59.86	52.78	51.44
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	0.16	0.14	0.14	20.57	24.40	25.51
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	24	24	24	23	23	23
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.00	0.00	0.00	17.98	10.00	8.96
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.00	0.00	0.00	0.26	0.29	0.26

¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

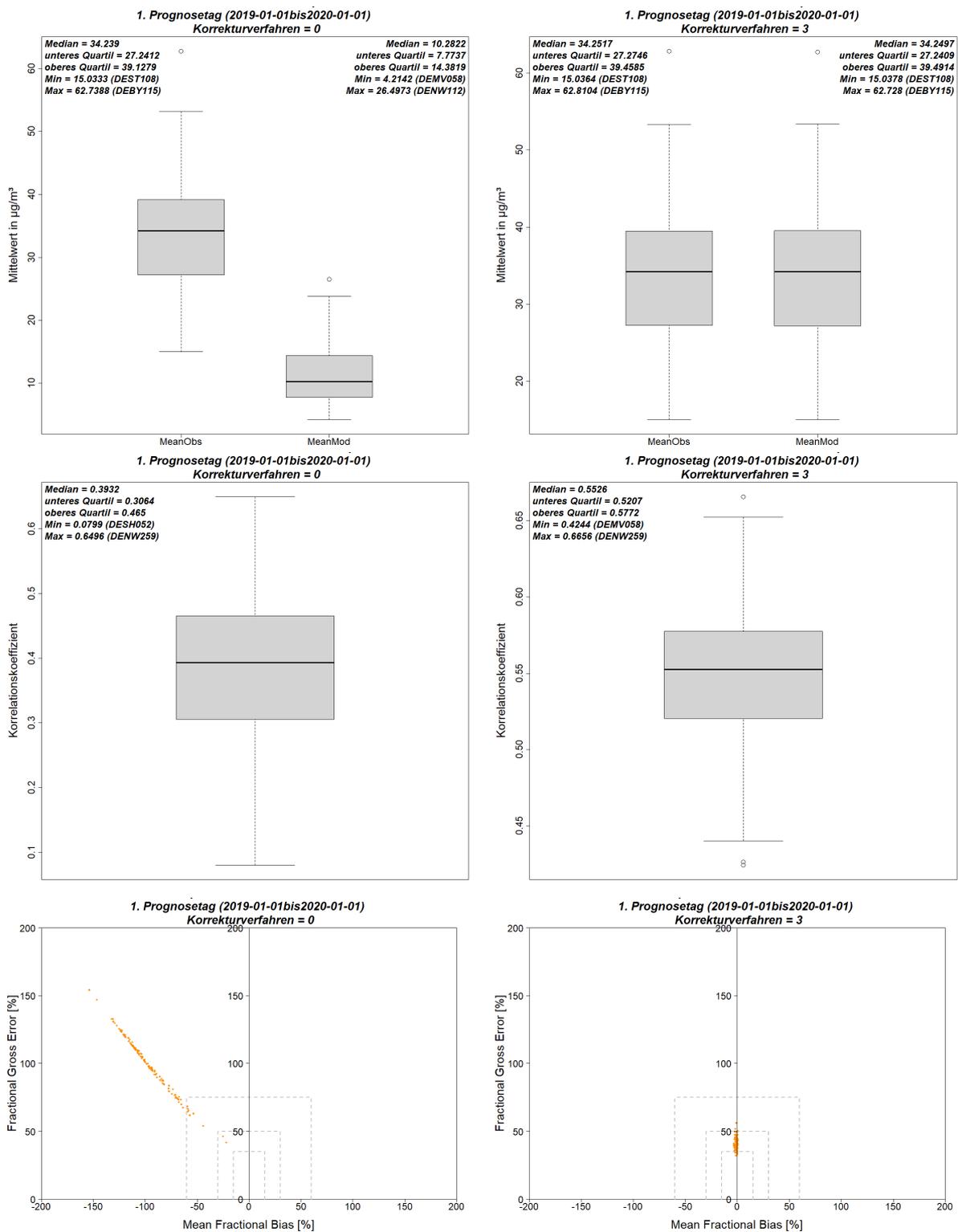
In Abbildung 43 sind die Box-Whisker-Plots für Mittelwerte und Korrelationskoeffizienten sowie die Soccer-Plots dargestellt, wie bisher links für die unkorrigierten und rechts für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten NO₂-Prognosen der Stundenmittelwerte, jeweils für den ersten Prognosetag.

Die Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (Abbildung 43, oben) zeigen wie bisher die effektive Biaskorrektur der prognostizierten NO₂-Stundenmittelwerte durch die Hybrid-Vorhersage, die über die gesamte Spannweite des betrachteten Stationskollektivs zum Tragen kommt. In den Box-Whisker-Plots der Korrelationskoeffizienten (Abbildung 43, Mitte) ist zu erkennen, dass der Korrelationskoeffizient bezüglich der Stundenmittelwerte durch die Hybrid-Vorhersage insbesondere bei den niedrigen Werten (Minimum, unteres Quartil) zunimmt. So steigt z. B. der minimale Korrelationskoeffizient im betrachteten Stationskollektiv von 0.08 an der Station

DESH052 Kiel Theodor-Heuss-Ring auf 0.42 an der Station DEMV058 Neubrandenburg Woldegker Straße. Der maximale Korrelationskoeffizient ergibt sich sowohl für die unkorrigierten als auch für die korrigierten CAMS-Prognosen an der Station DENW259 Mönchengladbach Friedrich-Ebert-Straße, er steigt nur noch wenig von knapp 0.65 auf knapp 0.67.

Im Soccer-Plot für die unkorrigierten CAMS-Prognosen zeigen alle Verkehrsstationen einen negativen MFB (Abbildung 43, unten links). Die stark lineare Gruppierung der Stationspunkte deutet darauf hin, dass bei den NO₂-Stundenmittelwerten an den verkehrsnahen Stationen im Wesentlichen systematische Fehler in den CAMS-Prognosedaten dominieren. Nach Korrektur mit der Hybrid-Vorhersage liegen die Stationspunkte sehr nahe an der y-Achse, d. h. der MFB geht an allen Stationen deutlich zurück, wobei der Schwerpunkt der Stationspunkte weiterhin im negativen Bereich des MFB liegt. Der FGE geht durch die Anwendung der Hybrid-Vorhersage ebenfalls an allen Stationen sichtbar zurück (Abbildung 43, unten rechts).

Abbildung 43: NO₂-Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Mittelwerte (oben) und Korrelationskoeffizienten (Mitte) an den Stationsorten sowie Soccer Plots (unten) über alle Verkehrsstationen, 1. Prognostag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



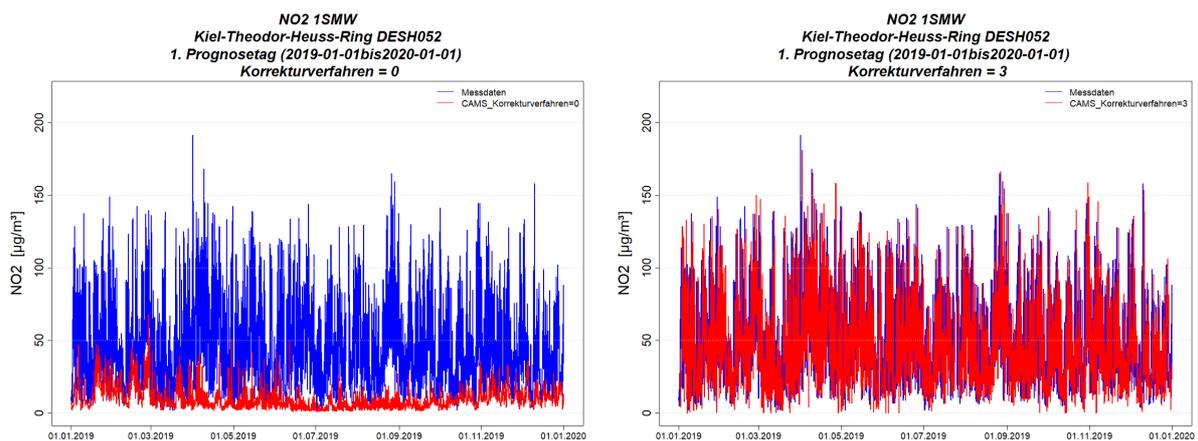
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 44 zeigt beispielhaft die Zeitreihen der NO₂-Stundenmittelwerte 2019 für die Station mit dem niedrigsten (oben, Station DESH052 Kiel Theodor-Heuss-Ring) und mit dem höchsten

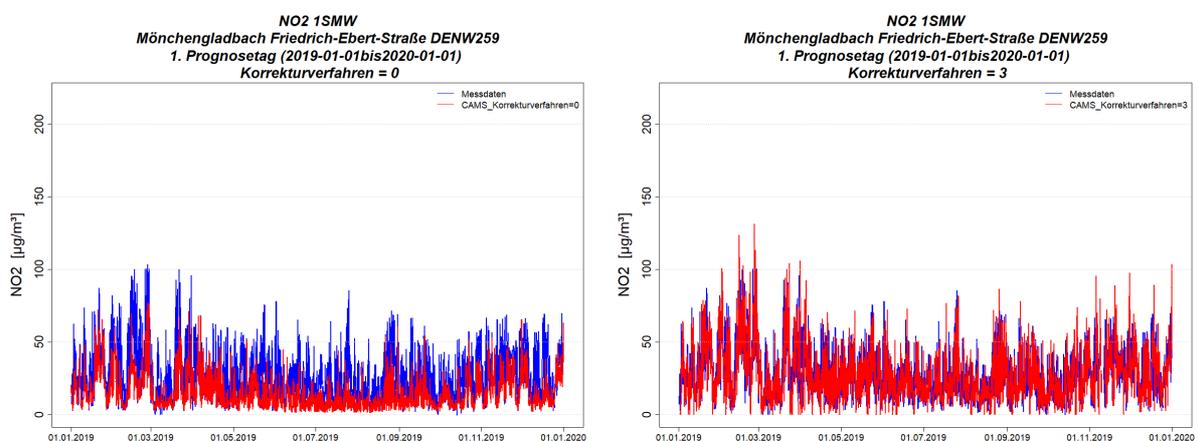
(unten, DENW259 Mönchengladbach Friedrich-Ebert-Straße) Korrelationskoeffizienten der unkorrigierten CAMS-Prognosen.

Anhand der Stundenmittelwert-Zeitreihen für das ganze Jahr 2019 ist zunächst wieder zu erkennen, dass die unkorrigierten Prognosen die Messwerte im Regelfall unterschätzen, und dies an der hochbelasteten Station DESH052 deutlich stärker als an der Station DENW259. Die Korrektur der CAMS-Prognosen durch die Hybrid-Vorhersage führt an beiden Stationen zu einer deutlich besseren Erfassung der Zeitreihe und ihrer Maximalwerte, wobei es wie schon an den NO₂-Area-Stationen immer wieder zu Überschätzungen der gemessenen Spitzenwerte durch die korrigierten CAMS-Prognosen kommt.

Abbildung 44: NO₂-Stundenmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



Die Abbildung zeigt beispielhaft die Zeitreihen der NO₂-Stundenmittelwerte 2019 für die Station mit dem niedrigsten (oben, Station DESH052 Kiel Theodor-Heuss-Ring) und mit dem höchsten (unten, DENW259 Mönchengladbach Friedrich-Ebert-Straße) Korrelationskoeffizienten der unkorrigierten CAMS-Prognosen.



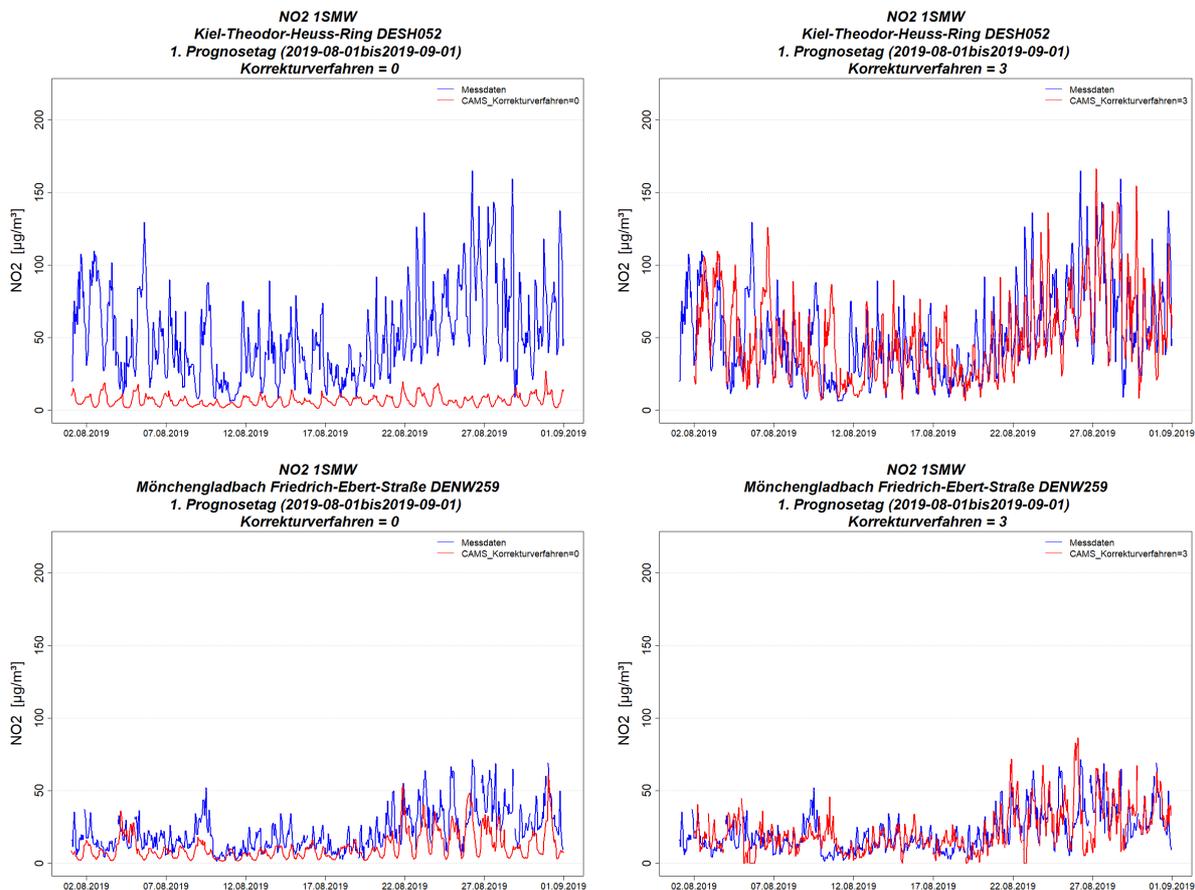
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Die Betrachtung der Zeitreihen am Beispiel des Monats August 2019 (Abbildung 45) zeigt, dass an der Station DESH052 die unkorrigierten CAMS-Prognosen den gemessenen Tagesgang der NO₂-Konzentration nicht abbilden können. Die Prognosen beschreiben wie an der Station

DEHE063 (Abbildung 37) eher den großräumigen Hintergrund, der aufgrund photochemischer Effekte seine niedrigsten Werte täglich um die Mittagszeit aufweist, und berücksichtigen nicht den Einfluss des Verkehrs, der niedrigere Konzentrationen in der Nacht und höhere Werte im Tagesverlauf bewirkt. Dieses gegenläufige Verhalten ist auch einer der Gründe für den niedrigen Korrelationskoeffizienten von 0.08 zwischen Messung und unkorrigierter CAMS-Prognose an dieser Station. An der Station DENW259, für die ein Korrelationskoeffizient von knapp 0.65 berechnet wurde, stimmen die Tagesgänge von Messung und unkorrigierter CAMS-Prognose deutlich besser überein. Allerdings werden auch hier die gemessenen Konzentrationsspitzen von den CAMS-Prognosen in den meisten Fällen deutlich unterschätzt.

Durch die Anwendung der Hybrid-Vorhersage wird der Tagesgang an der Station DESH052 deutlich besser erfasst. Zudem wird durch die Korrektur sowohl an der Station DESH052 als auch an der Station DEHE008 der Wertebereich der Messwerte besser erfasst. Aufgrund der starken Variabilität der Zeitreihen tritt hier der bereits zuvor beschriebene zeitliche Verzug von einem Tag, mit dem gemessene Konzentrationsspitzen an das korrigierte Modell weitergereicht werden, häufiger auf als bei den bisherigen Beispielen. Dies führt auch zu dem deutlichen Anstieg der FAR, wie er in Tabelle 13 aufgeführt und mit Abbildung 46 noch diskutiert wird. Trotzdem erhöht sich der Korrelationskoeffizient durch die Korrektur für die Station DESH052 von 0.08 auf 0.52 und für die Station DENW259 von knapp 0.65 auf knapp 0.67.

Abbildung 45: NO₂-Stundenmittelwerte: Zeitreihen der Mess- und Modelldaten an der Station mit dem niedrigsten (oben) und dem höchsten (unten) Korrelationskoeffizienten, 1. Prognosestag, Zeitraum August 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.

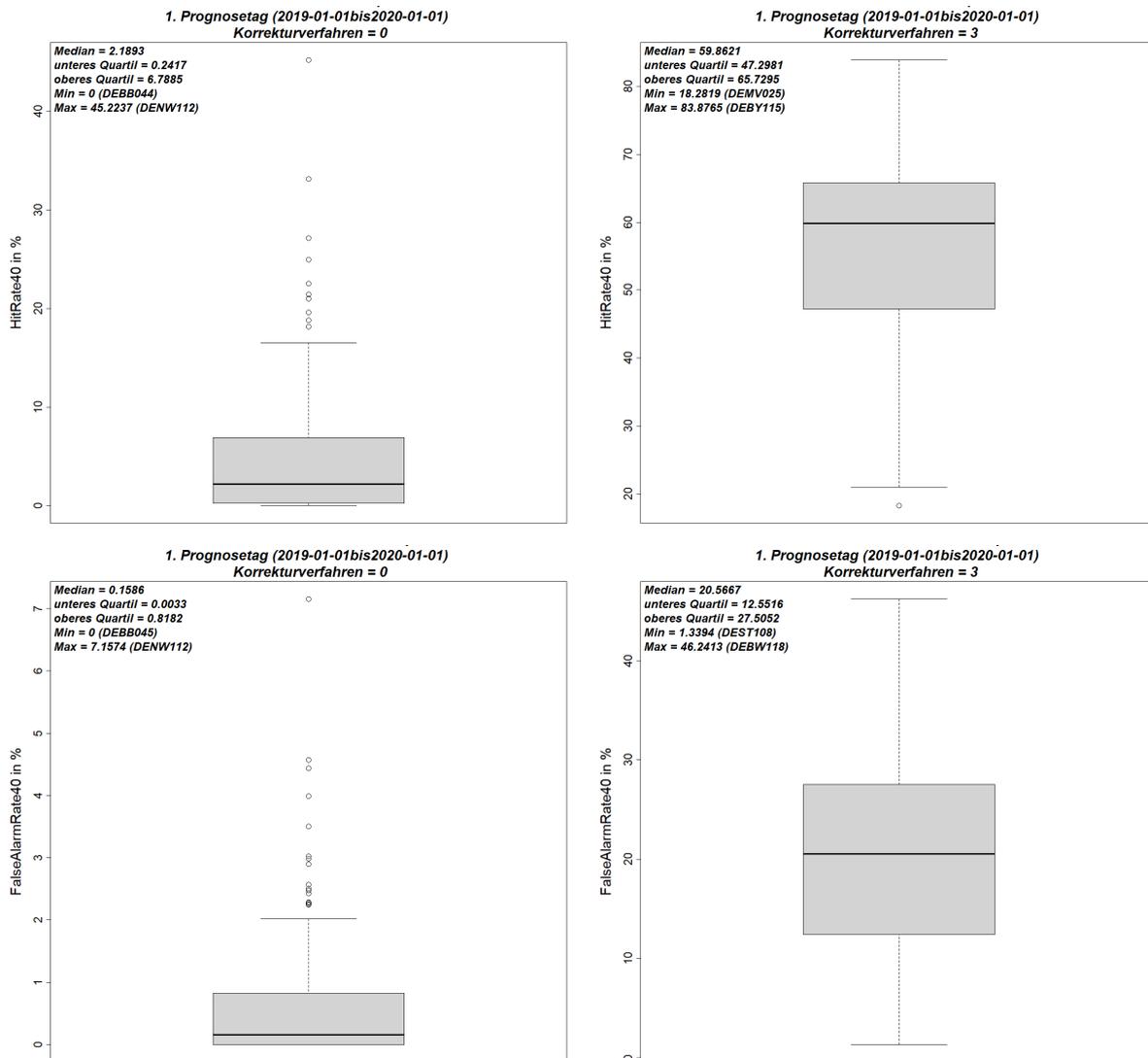


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 46 zeigt die Box-Whisker-Plots der Hit Rate und der FAR für die NO₂-Stundenmittelwerte bei einem Schwellenwert von 40 µg/m³, jeweils für den ersten Prognosestag. Im Median wurden im Jahr 2019 2830 Überschreitungen des Schwellenwertes von 40 µg/m³ beobachtet, im Maximum traten 6403 Überschreitungen auf (an der Station DEBY115 München/Landshuter Allee).

Für die unkorrigierten CAMS-Prognosen ergibt sich im Median eine Hit Rate von 2.2 %, im Maximum wird eine Hit Rate von 45.2 % erreicht, und zwar an der Station DENW112 Duisburg Kardinal-Galen-Straße. Entsprechend der niedrigen Hit Rate ist auch die FAR sehr niedrig, sie liegt im Median bei 0.16 % und im oberen Quartil bei 0.82 %. Der Maximalwert ergibt sich mit 7.2 % für die Station mit der höchsten Hit Rate, DENW112. Durch die Korrektur der CAMS-Prognosen mit der Hybrid-Vorhersage erhöht sich die Hit Rate im Median auf 59.9 %, das untere Quartil steigt von 0.24 % auf 47.3 %, und das Maximum wird an der Station DEBY115 mit 83.9 % erreicht. Für die FAR ergibt sich bei den korrigierten CAMS-Prognosen ein Median von 20.6 %, ein oberes Quartil von 27.5 % und ein Maximalwert von 46.2 %, letzterer an der Station DEBW118 Stuttgart Am Neckartor. An der Station mit der höchsten Hit Rate der korrigierten CAMS-Prognosen, DEBY115, ergibt sich durch die Korrektur eine FAR von 42.3 %, was dem zweithöchsten Wert für die FAR aus dem betrachteten Stationskollektiv entspricht.

Abbildung 46: NO₂-Stundenmittelwerte: Box-Whisker-Plots der Hit Rate (oben) und der False Alarm Rate (unten) an den Stationsorten über alle Verkehrsstationen bei einem Schwellenwert von 40 µg/m³. 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



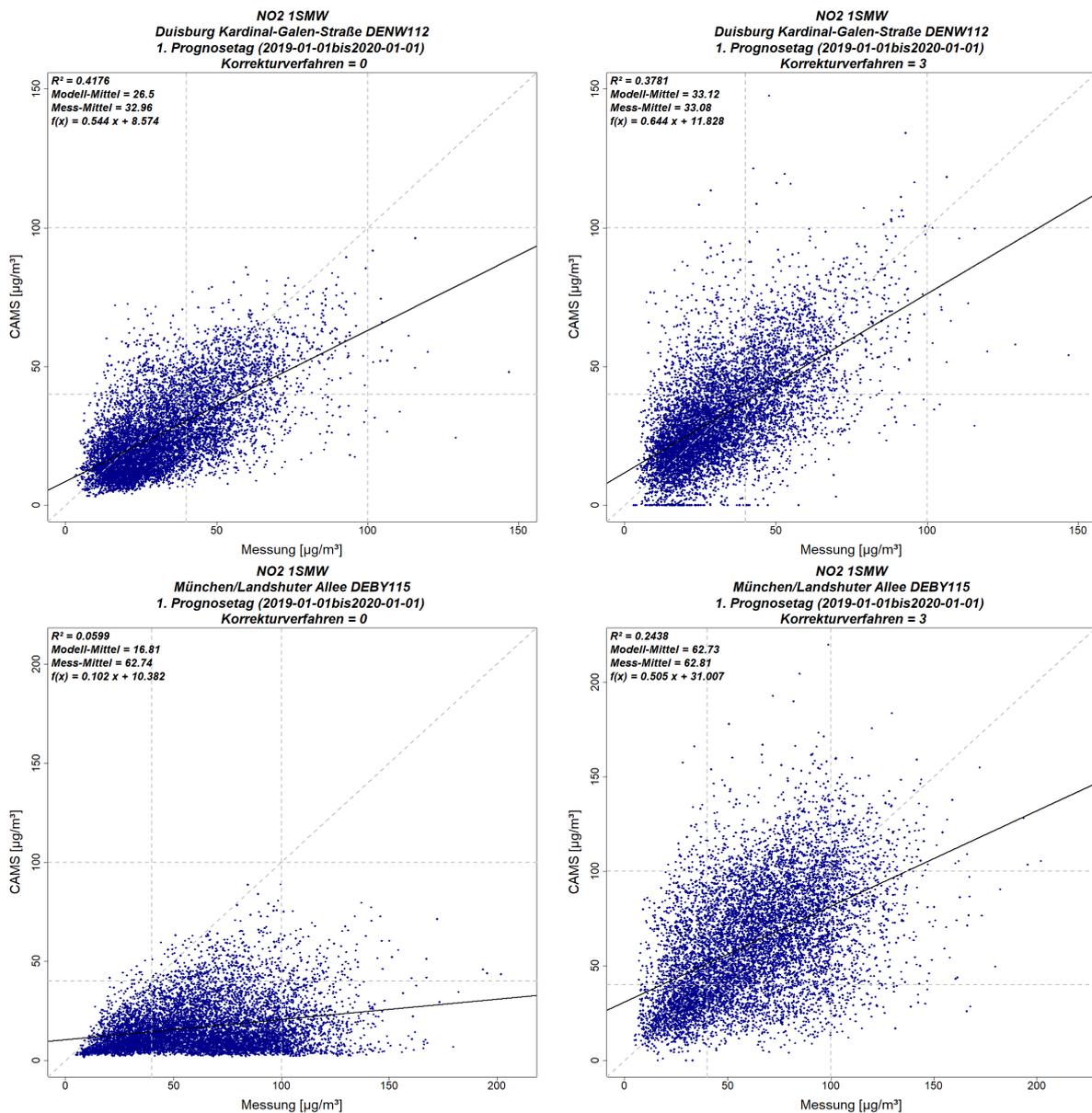
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 47 sind beispielhaft die Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte für zwei Stationen dargestellt, von denen die eine die maximale Hit Rate von 45.2 % bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen aufweist (DENW112 Duisburg Kardinal-Galen-Straße, oben) und die andere die maximale Anzahl von beobachteten Überschreitungen des Schwellenwertes von 40 µg/m³ (6403 Überschreitungen, DEBY115 München/Landshuter Allee, unten) und gleichzeitig die höchste Hit Rate von 83.9 % bei den korrigierten CAMS-Prognosen.

Für die Station DENW112 steigt die Hit Rate durch die Anwendung der Hybrid-Vorhersage von 45.2 % auf 64.3 %, die FAR steigt dabei von 7.2 % auf 16.4 %. Der Mittelwert der Messdaten, der durch das unkorrigierte Modell deutlich unterschätzt wird, wird durch die korrigierten Prognosen gut wiedergegeben. Das Bestimmtheitsmaß für diese Station geht durch die Korrektur von knapp 0.42 auf knapp 0.38 zurück.

Für die Station DEBY115 erhöhen sich Hit Rate und FAR durch die Hybrid-Vorhersage deutlich. Die Hit Rate steigt von 8.7 % auf 83.9 % und die FAR von 0.64 % auf 42.3 % an. Durch die Korrektur wird zudem der Mittelwert der unkorrigierten Prognosedaten, der bei $16.8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ liegt, auf den Mittelwert der Messdaten angehoben, der bei $62.8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ liegt. Das Bestimmtheitsmaß verbessert sich von 0.06 auf 0.24.

Abbildung 47: NO₂-Stundenmittelwerte: Scatterplots mit hohen Werten für die Hit Rate im Original (oben) bzw. in den korrigierten CAMS-Prognosen (unten). 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: unkorrigierte CAMS-Prognosen. Rechts: mit der Hybrid-Vorhersage korrigierte CAMS-Prognosen.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 48 zeigt die mit dem FAIRMODE-DELTA-Tool erzeugten Assessment Target Plots für die NO₂-Verkehrsstationen für alle drei Prognosetage, wie bereits bisher links für die unkorrigierten und rechts für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen. Ausgewertet wurden die NO₂-Stundenmittelwerte.

Für die unkorrigierten CAMS-Prognosen befinden sich die Stationspunkte zu großen Teilen außerhalb der grünen Ellipse. Dabei teilen sich die Stationspunkte wieder in zwei Cluster auf. Für den größeren Teil der Stationen wird der Modellfehler durch den Korrelationskoeffizienten R dominiert und für den kleineren Teil durch die Standardabweichung SD. Der stundenbezogene MQI_{HD} ist für alle drei Prognosetage größer als 1 und steigt mit Werten zwischen 1.250 am 1. Prognosetag und 1.260 am 3. Prognosetag nur geringfügig über die Prognosetage an. Der

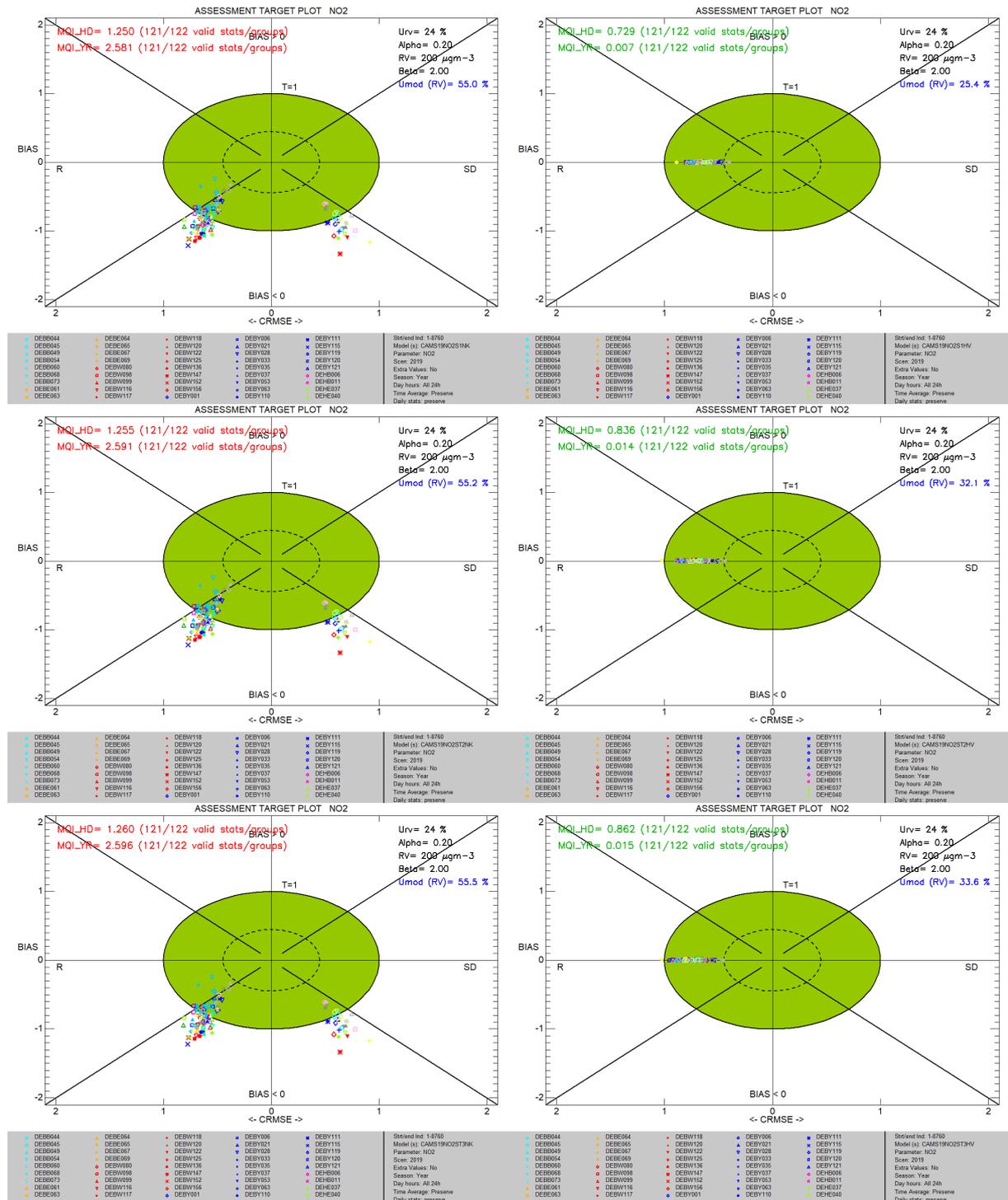
MQI_YR liegt mit Werten zwischen 2.581 und 2.596 sehr deutlich über 1. Das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO ist demnach für keinen der drei Prognosetage erfüllt.

Die Korrektur durch die Hybrid-Vorhersage reduziert den MQI_YR wie schon zuvor drastisch von 1.250 auf 0.007 am 1. Prognosetag, der MQI_YR steigt auch bis zum 3. Prognosetag nur geringfügig auf 0.015 an. Der MQI_HD ist nach der Korrektur am 1. Prognosetag mit 0.729 ebenfalls deutlich niedriger als für die unkorrigierten Prognosen. Der MQI_HD steigt für die korrigierten Prognosen über die Prognosetage an, ist aber am 3. Prognosetag mit 0.862 immer noch niedriger als für die unkorrigierten Prognosen am 1. Prognosetag und ist außerdem durchweg kleiner als 1. Das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO ist damit für die korrigierten CAMS-Prognosen für alle drei Prognosetage erfüllt. Wie bei den bisherigen Auswertungen liegen auch für die NO₂-Verkehrsstationen alle Stationspunkte sehr dicht an der x-Achse, was wieder auf den geringen Bias der korrigierten CAMS-Prognosen hinweist. Wie bisher wird der Modellfehler im Unterschied zu den unkorrigierten Prognosen an allen Stationen durch den Korrelationskoeffizienten R dominiert. Wie in Abschnitt 7.1 ausgeführt, wird davon ausgegangen, dass der Grund dafür in dem zeitlichen Verzug der korrigierten Zeitreihen liegt, der anhand der exemplarischen Zeitreihenbetrachtungen in Abbildung 45 beschrieben wurde und der aufgrund der starken Variabilität der NO₂-Zeitreihen an verkehrsnahen Messstationen hier häufiger auftritt als in den bisherigen Beispielen.

Im Forecast-Modus erfüllen die unkorrigierten CAMS-Prognosen wie zuvor das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO_Forecast an keinem der drei Prognose-Tage (Abbildung 49, links). Für die verkehrsnahen NO₂-Messstationen liegen an allen drei Prognosetagen fast alle Stationspunkte außerhalb der grünen Ellipse, d. h. sie erfüllen das Kriterium $MQI_Forecast \leq 1$ nicht. Entsprechend liegt auch das angegebene 90. Perzentil der MQI_Forecast aller Stationen mit 1.834 am 1. Prognosetag und 1.549 am 3. Prognosetag deutlich über 1. Gemäß Abschnitt 5.2 ist damit das persistente Modell an allen drei Prognosetagen besser als die unkorrigierte CAMS-Prognose. Ähnlich wie bei NO₂ an den Area-Stationen sind fast alle Stationspunkte auf der rechten Seite des Forecast Target Plots lokalisiert, d. h., an fast allen Verkehrsstationen ist die Anzahl der False Alarms größer als die Anzahl der Missed Alarms.

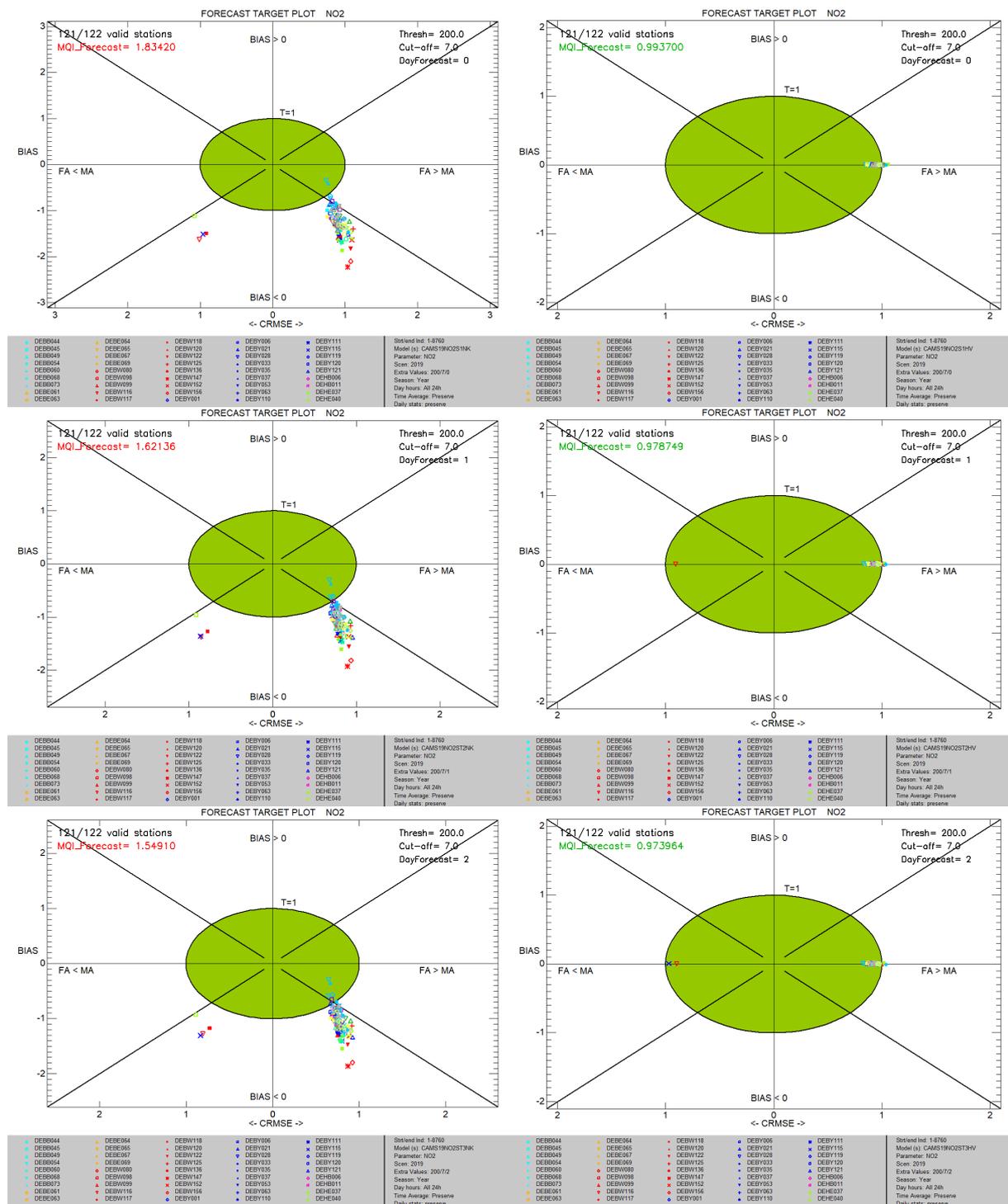
Für die mit der Hybrid-Vorhersage korrigierten CAMS-Prognosen liegt das 90. Perzentil mit Werten zwischen 0.994 am 1. Prognosetag und 0.974 am 3. Prognosetag knapp unter 1 (Abbildung 49, rechts). Für die korrigierten CAMS-Prognosen ist demnach das MQO_Forecast an allen drei Prognosetagen erfüllt.

Abbildung 48: Assessment Target Plots NO₂ Verkehrsstationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognostetag



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 49: Forecast Target Plots NO₂ Verkehrsstationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), Bezugsjahr 2019, 1. bis 3. Prognostetag



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 50 ist die dynamische Evaluierung für die Zeitbezüge Tag – Nacht (oben), Sommer – Winter (Mitte) und Wochentag – Wochenende (unten) für die NO₂-Verkehrsstationen dargestellt, jeweils für den 1. Prognostetag.

Auffällig ist hier, dass bei den unkorrigierten CAMS-Prognosen (Abbildung 50, links) die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Tag und Nacht immer noch ausschließlich negativ sind, d. h. die modellierten NO₂-Konzentrationen wurden an allen verkehrsnahen

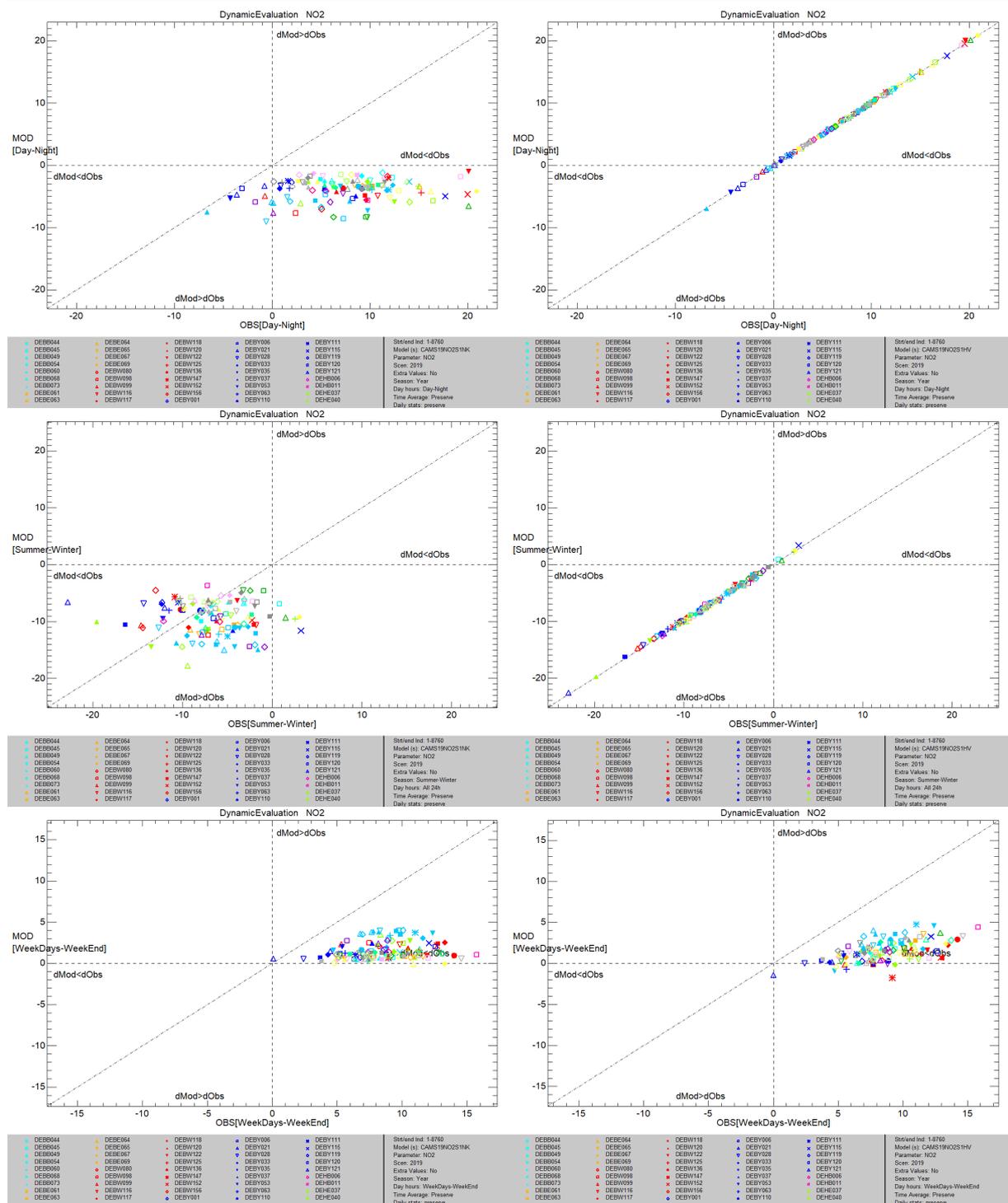
Stationen im Mittel nachts höher modelliert als tagsüber. Dies entspricht eher einem ländlich-regionalen Regime (siehe z. B. IVU Umwelt, laufend). Es werden maximale Konzentrationsdifferenzen von ca. $-9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ erreicht. Die mittleren Differenzen zwischen Tag und Nacht bei den Messwerten hingegen liegen im Wesentlichen im positiven Bereich mit Werten bis ca. $21 \mu\text{g}/\text{m}^3$; einige wenige Stationen weisen auch mittlere negative Differenzen in den Messwerten auf mit Werten bis ca. $-7 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Die beobachteten mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht werden demnach durch die unkorrigierten CAMS-Prognosen an den meisten verkehrsnahen Messstationen für NO_2 grundsätzlich falsch beschrieben.

Die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Sommer und Winter hingegen verhalten sich an den verkehrsnahen Messstationen für NO_2 ähnlich wie an den Spot-Stationen für PM_{10} . Für die unkorrigierten CAMS-Prognosen sind die mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Sommer und Winter negativ, d. h. die modellierten NO_2 -Konzentrationen sind im Mittel im Winter höher als im Sommer. Die mittleren Differenzen der Messwerte sind an den meisten Stationen ebenfalls negativ. Allerdings ergeben sich bei den CAMS-Prognosen Differenzen bis zu $-18 \mu\text{g}/\text{m}^3$, während bei den Messwerten Differenzen bis zu $-23 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bzw. im positiven Bereich bis $+3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auftreten, und die Stationspunkte sind ähnlich stark gestreut wie bei den Tag – Nacht – Differenzen.

In beiden Fällen führt die Korrektur der CAMS-Prognosen durch die Hybrid-Vorhersage dazu, dass die prognostizierten mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht bzw. zwischen Sommer und Winter mit den beobachteten Differenzen sehr gut übereinstimmen, so dass die Stationspunkte sehr nah entlang der 1:1-Diagonalen verteilt sind (Abbildung 50, rechts).

Die mittleren Differenzen der Konzentrationen zwischen Wochentag und Wochenende sind wie bei den NO_2 -Area-Stationen sowohl für die unkorrigierten CAMS-Prognosen als auch für die Messwerte im Regelfall positiv, d. h. die modellierten bzw. gemessenen NO_2 -Konzentrationen sind im Mittel unter der Woche höher als am Wochenende. Allerdings sind die Stationspunkte zwischen der 1:1-Diagonalen und dem positiven Ast der x-Achse lokalisiert, d. h. die mittleren Differenzen der Messwerte werden im Regelfall durch die CAMS-Prognosen unterschätzt (Abbildung 50, links unten). Im Gegensatz zu den oben betrachteten Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht sowie zwischen Sommer und Winter führt die Anwendung der Hybrid-Vorhersage bei den Konzentrationsdifferenzen zwischen Wochentag und Wochenende tendenziell eher zu einer noch stärkeren Streuung der Stationspunkte und damit zu einer Verschlechterung bei der dynamischen Evaluierung (Abbildung 50, rechts unten).

Abbildung 50: Dynamische Evaluierung NO₂ Verkehrsstationen für unkorrigierte CAMS-Prognosen (links) und Hybrid-Vorhersage (rechts), 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben: Tag – Nacht. Mitte: Sommer – Winter. Unten: Wochentag – Wochenende.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

7.5 Fazit

Die in diesem Kapitel vorgestellten Auswertungen zeigen, wie die reinen CAMS-Prognosen die PM₁₀- und NO₂-Messwerte sowohl an den Area- als auch an den Spot- bzw. Verkehrsstationen im Regelfall unterschätzen. Dabei ist die Unterschätzung an den Spot- bzw. Verkehrsstationen

besonders ausgeprägt. Die beschriebenen Unterschätzungen entsprechen den Erwartungen bzw. spiegeln die Problemstellung wider (vgl. Kapitel 1), denn die Ergebnisse der CAMS-Modellierung liegen in einer horizontalen Auflösung von ca. $7 \times 11 \text{ km}^2$ vor und beschreiben nur den regionalen Hintergrund.

Die Korrektur der CAMS-Prognosen an den Stationsorten durch die Hybrid-Vorhersage führt zu einer effektiven Biaskorrektur, unabhängig von Schadstoff und Stationstyp. In allen betrachteten Fällen wurde der Mittelwert, der Maximalwert und die Standardabweichung der unkorrigierten CAMS-Prognosen an den Stationsorten durch die Anwendung der Hybrid-Vorhersage im Median auf das Niveau der entsprechenden Kennwerte für die Messdaten angehoben. Dies führte im Regelfall auch zu einer verbesserten Erfassung von Schwellenwertüberschreitungen, d. h. zu einer z. T. deutlichen Steigerung der Hit Rate.

Dadurch, dass bei der verwendeten Form der Hybrid-Vorhersage die CAMS-Prognosen mit der Differenz zwischen Messung und Modell von einem oder mehreren Vortagen korrigiert werden, tritt ein zeitlicher Verzug gegenüber den Messungen auf, mit dem einzelne Spitzenwerte oder hochbelastete Episoden durch die korrigierte Prognose erfasst werden. Die Größe des zeitlichen Verzugs entspricht für den 1. Prognosetag der Anzahl der verwendeten Vorlauftage. Wenn wie im vorliegenden Projekt $n_{\text{Vorlauf}} = 1$ Tag verwendet wird, dann beträgt der zeitliche Verzug für den 1. Prognosetag einen Tag. Dieser zeitliche Verzug kommt aufgrund der stärkeren Variabilität der Zeitreihen bei NO_2 und insbesondere an den Verkehrsstationen stärker zum Tragen als bei PM_{10} und an den Area-Stationen. Er wirkt sich negativ auf Korrelationskoeffizient, FGE, Hit Rate und False Alarm Rate aus. Für den 2. und den 3. Prognosetag steigt der zeitliche Verzug entsprechend an, da Messwerte zum Zeitpunkt der jeweiligen Prognose immer nur maximal für den Tag vor dem 1. Prognosetag vorliegen. In der Konsequenz nehmen Korrelationskoeffizient und Hit Rate mit weiter entferntem Prognosetag im Median ab, und FGE und FAR nehmen zu. In den meisten Fällen wird aber trotzdem eine Verbesserung der Vorhersagegüte durch die Hybrid-Vorhersage gegenüber der reinen CAMS-Prognose erzielt.

Dies wird durch die Auswertungen im FAIRMODE-DELTA-Tool bestätigt. Für die unkorrigierten CAMS-Prognosen wird das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO an den Area-Stationen erreicht, aber nicht an den Spot- bzw. Verkehrsstationen. Nach Korrektur durch die Hybrid-Vorhersage wird das MQO an allen betrachteten Stationstypen erreicht, wobei MQI_{HR} und MQI_{YR} jeweils niedriger und damit besser ausfallen als für die unkorrigierten CAMS-Prognosen. Im Forecast-Modus des FAIRMODE-DELTA-Tools erfüllen die unkorrigierten CAMS-Prognosen das $\text{MQO}_{\text{Forecast}}$ weder an den Area- noch an den Spot- bzw. Verkehrsstationen, d. h. das persistente Modell ist in jedem Fall besser als die unkorrigierte CAMS-Prognose. Durch Anwendung der Hybrid-Vorhersage wird das $\text{MQO}_{\text{Forecast}}$ in fast allen Fällen erreicht. Die Ausnahme ist der 1. Prognosetag bei den NO_2 -Area-Stationen, an dem das 90. Perzentil der $\text{MQI}_{\text{Forecast}}$ mit 1.004 ganz knapp über 1 liegt.

Die dynamische Evaluierung der Zeitreihen mit dem FAIRMODE-DELTA-Tool zeigt, dass die mittleren Differenzen der Messwerte zwischen Tag und Nacht, Sommer und Winter sowie zwischen Wochentag und Wochenende von den unkorrigierten CAMS-Prognosen nicht korrekt erfasst werden. Speziell bei der Auswertung der mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht an den NO_2 -Verkehrsstationen wird deutlich, dass die CAMS-Prognosen den regionalen Hintergrund beschreiben und auch den zugehörigen Tagesgang abbilden, nicht aber den Tagesgang an einer verkehrsnahen NO_2 -Messstation. Die Korrektur der CAMS-Prognosen durch die Hybrid-Vorhersage führt dazu, dass die prognostizierten mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht bzw. zwischen Sommer und Winter mit den beobachteten Differenzen sehr gut übereinstimmen. Hinsichtlich der mittleren Konzentrationsdifferenzen

zwischen Wochentag und Wochenende hingegen führt die Anwendung der Hybrid-Vorhersage im Regelfall zu einer Verschlechterung der Übereinstimmung.

8 Evaluierung der Wochentagskorrektur

Wie in Abschnitt 7 anhand der dynamischen Evaluierung gezeigt wurde, führt die Anwendung der Hybrid-Vorhersage auf die CAMS-Prognose zu einer erheblichen Verbesserung der Übereinstimmung der modellierten mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht sowie zwischen Sommer und Winter im Vergleich mit den entsprechenden mittleren Differenzen der Messwerte. Bezüglich der mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Wochentag und Wochenende hingegen führt die Hybrid-Vorhersage tendenziell eher zu einer Verschlechterung der Übereinstimmung.

Eine Analyse der Korrekturwerte der Hybrid-Vorhersage, die sich aus dem zweiten Term der rechten Seite von Gleichung (1) ergeben, hat gezeigt, dass diese an Standorten verkehrsnaher Messstationen im Mittel häufig eine Wochentagsabhängigkeit aufweisen, wenn gemäß Abschnitt 4.1 $n_{\text{Vorlauf}} = 1$ Tag gesetzt wird. Dann werden an verkehrsnahen Messstationen die Modellwerte im Regelfall an Samstagen zu stark korrigiert, nämlich mit dem größeren Fehler von Freitag, und an Montagen zu wenig korrigiert, nämlich mit dem kleineren Fehler von Sonntag. Diese Wochentagsabhängigkeit der Korrekturwerte ist für NO_2 deutlich ausgeprägter als für PM_{10} (vgl. Abschnitt 4.2).

Basierend auf den Ergebnissen dieser Analyse wurde die in Abschnitt 4.2 beschriebene Wochentagskorrektur für die Hybrid-Vorhersage entwickelt. Im Folgenden wird ihr Einfluss auf die PM_{10} - und NO_2 -Prognose untersucht.

8.1 PM_{10} : Spot-Stationen

Tabelle 14 zeigt die mit der Testumgebung berechneten statistischen Kennwerte für die mit der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur korrigierten CAMS-Prognosen für PM_{10} -Tagesmittelwerte jeweils als Median über alle entsprechenden statistischen Kennwerte an den betrachteten Spot-Stationen für das Bezugsjahr 2019. Dargestellt sind die Mediane für die Mittelungszeiträume $n = 1, 2, 8, 12, 26$ und 52 Wochen, für die die Wochentagskorrekturfaktoren berechnet wurden (vgl. Abschnitt 4.2). Auf die Darstellung der Ergebnisse für die Mittelungszeiträume $n = 3, 4$ und 6 Wochen wurde hier aus Gründen der Übersichtlichkeit verzichtet, zumal sich die Werte im Wesentlichen zwischen den Ergebnissen für $n = 2$ Wochen und $n = 8$ Wochen einsortieren.

Wird $n = 1$ Woche gesetzt, d. h., die Wochentagskorrekturfaktoren werden aus den Differenzen der Korrekturwerte der entsprechenden beiden aufeinanderfolgenden Tage der Vorwoche berechnet, dann liegen Mittelwert, Maximalwert und Standardabweichung für die wochentagskorrigierte Hybrid-Vorhersage im Median höher als für die reine Hybrid-Vorhersage (Tabelle 9) und für die Messwerte. Der Korrelationskoeffizient sinkt gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage im Median von 0.79 auf 0.69 , RMSE, BIAS und FGE steigen an. Die Hit Rate steigt im Median von 25% auf 33.33% an und die FAR von 0.84% auf 1.13% , wobei an den PM_{10} -Spot-Stationen 2019 im Median nur 5 Überschreitungen des Schwellenwertes von $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ beobachtet wurden.

Bei $n = 2$ Wochen sind die Medianwerte von Mittelwert, Maximalwert und Standardabweichung gegenüber $n = 1$ Woche deutlich reduziert. Der Korrelationskoeffizient steigt auf 0.74 an. RMSE, BIAS, MFB und FGE sinken etwas, ebenso die FAR, während die Hit Rate konstant bleibt. Damit sind die Medianwerte gegenüber $n = 1$ Woche bereits deutlich verbessert, wenn auch bis auf den MFB und die Hit Rate noch immer etwas schlechter als bei der reinen Hybrid-Vorhersage.

Mit steigendem Mittelungszeitraum steigt die Vorhersagegüte der wochentagskorrigierten Hybrid-Vorhersage gegenüber $n = 1$ Woche, soweit sie mit Hilfe der statistischen Kennwerte beurteilt wird. Ab $n = 8$ Wochen ändert sich der Korrelationskoeffizient im Median nicht mehr,

er ist mit 0.78 nun fast identisch mit dem der reinen Hybrid-Vorhersage. Auch die anderen statistischen Kennwerte erfahren ab $n = 8$ Wochen keine wesentliche Veränderung mehr. Durch die Wochentagskorrektur werden demnach an den PM₁₀-Spot-Stationen im Median die Maximalwerte und die Standardabweichung etwas besser erfasst als von der reinen Hybrid-Vorhersage, der ohnehin schon niedrige MFB noch etwas reduziert und die Hit Rate etwas erhöht.

Tabelle 14: PM₁₀-Tagesmittelwerte: Statistische Kennwerte für die mit der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS HV), Wochentagskorrektur mit einem Mittelungszeitraum über 1, 2, 8, 12, 26 und 52 Wochen (WD1, ..., WD52), jeweils 1. Prognostag, Median über alle Spot-Stationen, 2019

Metrik	CAMS HV WD1	CAMS HV WD2	CAMS HV WD8	CAMS HV WD12	CAMS HV WD26	CAMS HV WD52
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	3.39	3.39	3.39	3.39	3.39	3.39
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.93	1.07	2.36	2.42	2.44	2.40
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.76	18.76	18.76	18.76	18.76	18.76
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	19.45	19.07	18.85	18.84	18.84	18.84
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	65.04	65.04	65.04	65.04	65.04	65.04
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	68.05	66.07	65.39	65.29	65.00	65.53
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	9.80	9.80	9.80	9.80	9.80	9.80
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	10.58	10.28	9.77	9.71	9.68	9.71
Korrelation [-]	0.69	0.74	0.78	0.78	0.78	0.78
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	8.20	7.52	6.64	6.57	6.53	6.51
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.64	0.33	0.08	0.07	0.07	0.07
MFB [%]	0.63	-0.01	0.14	0.25	0.20	0.20
FGE [%]	33.43	31.16	26.82	26.18	26.11	26.23
MeasExc ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	5	5	5	5	5	5
Hit Rate ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	33.33	33.33	30.00	33.33	33.33	33.33
FAR ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	1.13	0.88	0.85	0.85	0.85	0.85

¹: Schwellenwert $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$

In Tabelle 15 sind die mit dem FAIRMODE-DELTA-Tool berechneten Modellierungsqualitäts-Indikatoren MQI_{HD} und MQI_{HD} sowie MQI_{Forecast} für die reine Hybrid-Vorhersage sowie für die wochentagskorrigierte Hybrid-Vorhersage mit Mittelungszeiträumen von $n = 1, 2, 3, 4, 6, 8, 12, 26$ und 52 Wochen zusammengestellt.

Die drei Modellierungsqualitäts-Indikatoren liegen bis auf den MQI_{Forecast} für $n = 1$ Woche unter 1, das Modellierungsqualitäts-Ziel ist demnach für die reine Hybrid-Vorhersage sowie alle wochentagskorrigierten Varianten bis auf $n = 1$ Woche grundsätzlich erfüllt. Die niedrigsten und damit besten Werten ergeben sich für die reine Hybrid-Vorhersage. Die höchsten Werte weist die wochentagskorrigierte Hybrid-Vorhersage mit $n = 1$ Woche auf, danach sinken die Werte mit steigendem n wieder, wobei auch hier ab $n = 8$ Wochen nur noch geringfügige Veränderungen

auftreten. Die zweitniedrigsten Werte und damit die besten Werte für die wochentagskorrigierten Varianten ergeben sich für $n = 26$ Wochen, danach steigt für $n = 52$ Wochen der MQI_YR wieder leicht an, während der MQI_Forecast noch etwas reduziert wird.

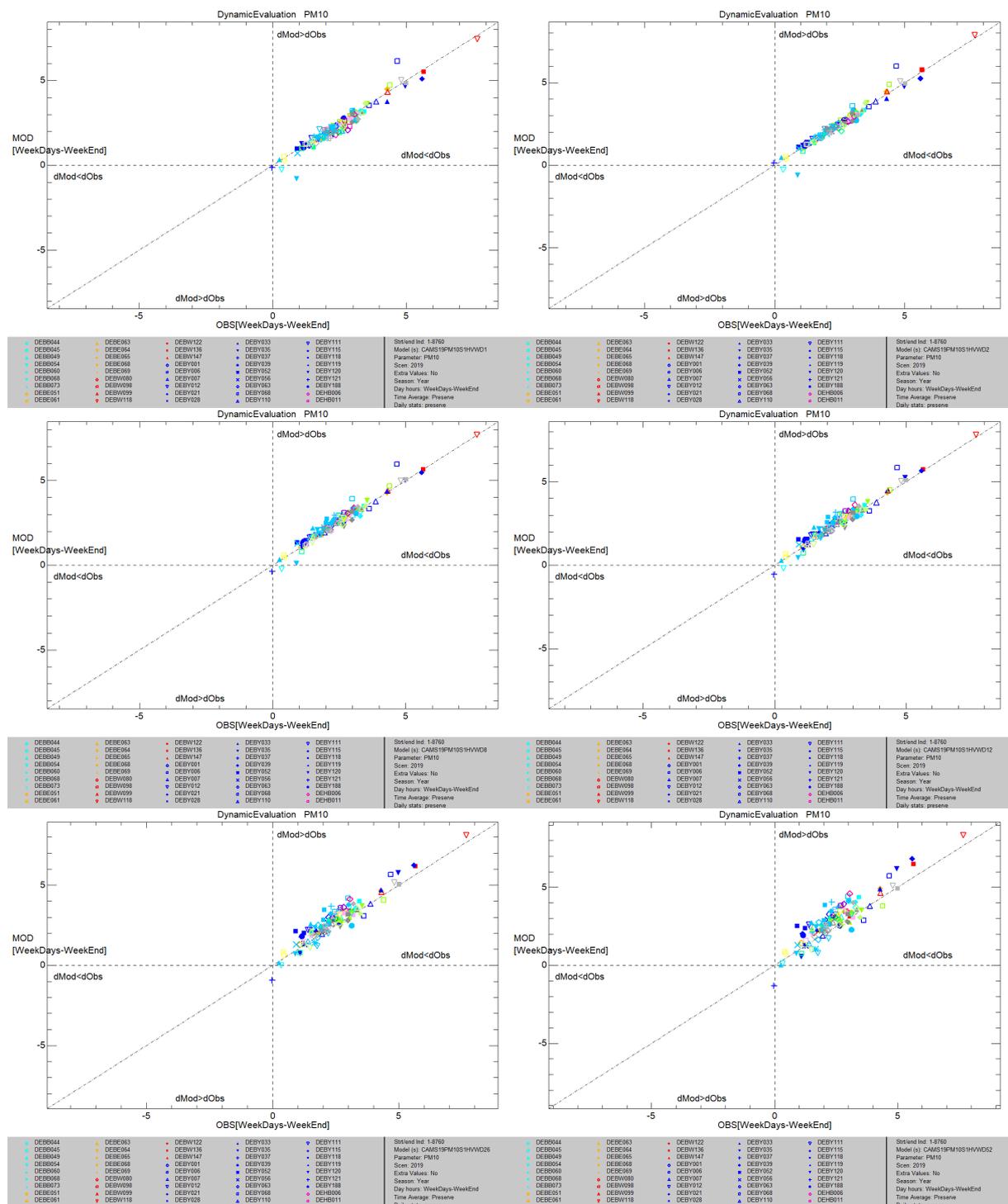
Tabelle 15: PM₁₀-Tagesmittelwerte: MQI_HD, MQI_YR und MQI_Forecast für die Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentagskorrektur, Wochentagskorrekturfaktor als Mittelwert über 1, 2, 3, 4, 6, 8, 12, 26 und 52 Wochen

Anzahl Wochen des Mittelungszeitraums	MQI_HD	MQI_YR	MQI_Forecast
ohne Wochentagskorrektur	0.598	0.011	0.831
1	0.774	0.131	1.087
2	0.700	0.077	0.979
3	0.669	0.054	0.940
4	0.654	0.042	0.917
6	0.638	0.034	0.889
8	0.624	0.028	0.870
12	0.622	0.025	0.862
26	0.618	0.025	0.862
52	0.618	0.028	0.857

Abbildung 51 zeigt die dynamische Evaluierung für den Zeitbezug Wochentag – Wochenende für die PM₁₀-Spot-Stationen 2019, jeweils für den 1. Prognosestag. Dargestellt sind die Ergebnisse für die wochentagskorrigierte Hybrid-Vorhersage mit $n = 1, 2, 8, 12, 26$ und 52 Wochen. Grundsätzlich zeigen alle sechs Plots eine deutlich bessere Verteilung der Stationspunkte entlang der 1:1-Diagonalen und damit eine deutlich bessere Übereinstimmung der modellierten mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Wochentag und Wochenende mit den mittleren Differenzen der Messwerte als die reine CAMS-Prognose oder die reine Hybrid-Vorhersage (vgl. Abbildung 30, unten).

Dabei liegen die Stationspunkte für $n = 2$ Wochen (Abbildung 51, oben rechts) am dichtesten an der 1:1-Diagonalen, danach wird die Streuung um die Diagonale mit steigendem n stärker, wobei die generelle Ausrichtung der Punktwolke entlang der Diagonalen erhalten bleibt. Am stärksten ist die Streuung für $n = 52$ Wochen (Abbildung 51, unten rechts).

Abbildung 51: Dynamische Evaluierung Wochentag – Wochenende an den PM₁₀ Spot-Stationen für die mit der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur korrigierten CAMS-Prognosen, 1. Prognostag, Bezugsjahr 2019. Mittelungszeitraum der Wochentagskorrektur: 1 bzw. 2 Wochen (oben); 8 bzw. 12 Wochen (Mitte); 26 bzw. 52 Wochen (unten).



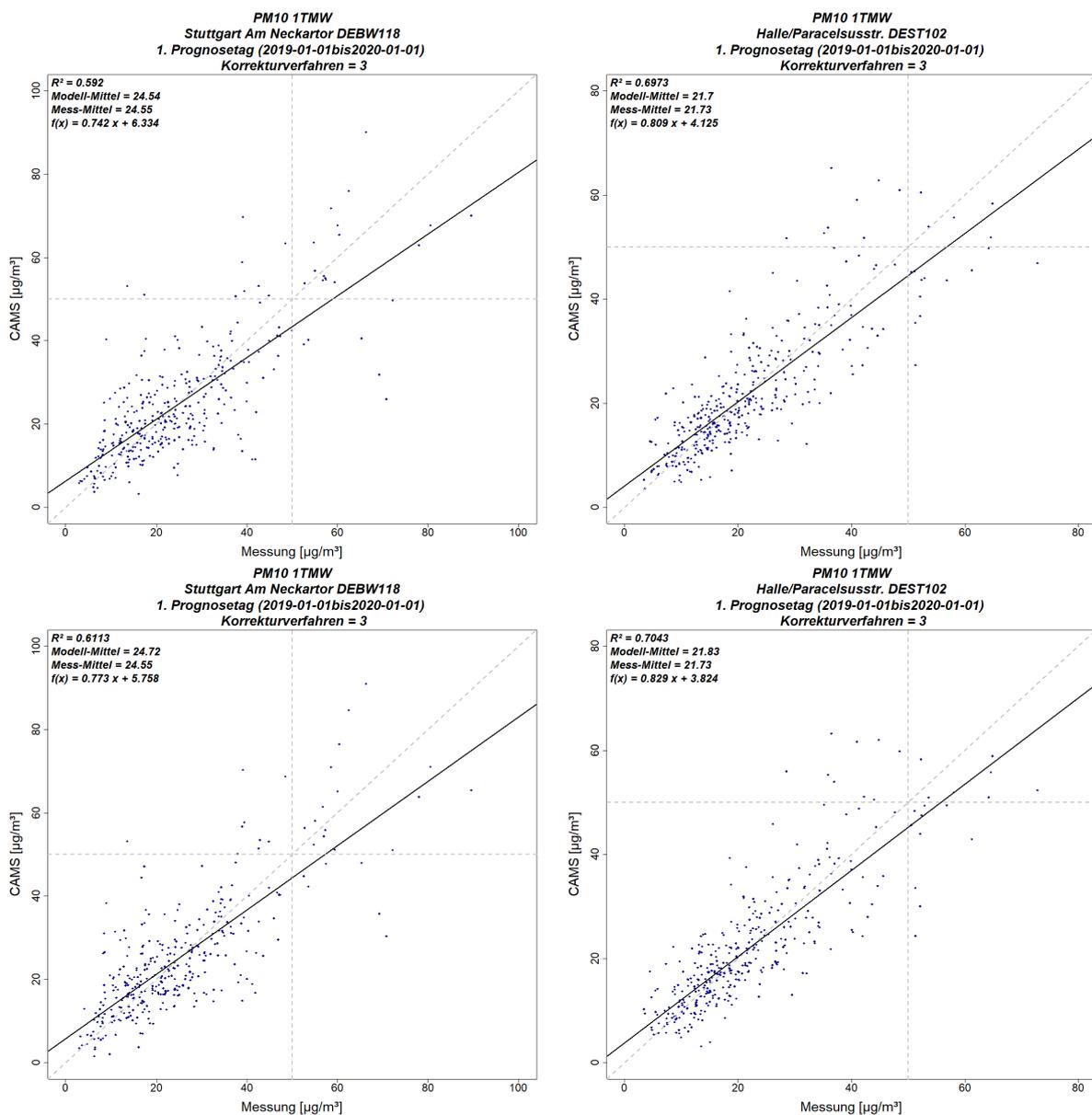
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Auf Basis der vorgestellten Ergebnisse wurde für die weiteren Arbeiten im Projekt ein Mittelungszeitraum von $n = 26$ Wochen zur Bestimmung der Wochentagskorrekturfaktoren gewählt (siehe Abschnitt 8.3). In Abbildung 52 sind die Scatterplots für zwei Stationen zusammenge-

stellt, oben für die reine Hybrid-Vorhersage und unten für die Wochentagskorrektur mit $n = 26$ Wochen. An der einen Station (links, DEBW118 Stuttgart Am Neckartor) wurde die größte Verbesserung des Korrelationskoeffizienten und an der anderen Station (rechts, DEST102 Halle/Paracelsusstraße) die größte Verbesserung der Hit Rate durch die Wochentagskorrektur erzielt.

Die größte Verbesserung des Korrelationskoeffizienten liegt demnach bei PM10-Spot-Stationen bei einem Prozentpunkt, von 0.77 auf 0.78 an der Station DEBW118. Die größte Verbesserung der Hit Rate beträgt knapp 12 Prozentpunkte, von 29.4 % auf 41.2 % an der Station DEST102. Die FAR steigt an dieser Station dabei minimal von 2.3 % auf 2.6 %. An beiden Stationen steigt die Steigung der Regressionsgeraden durch die Wochentagskorrektur minimal an.

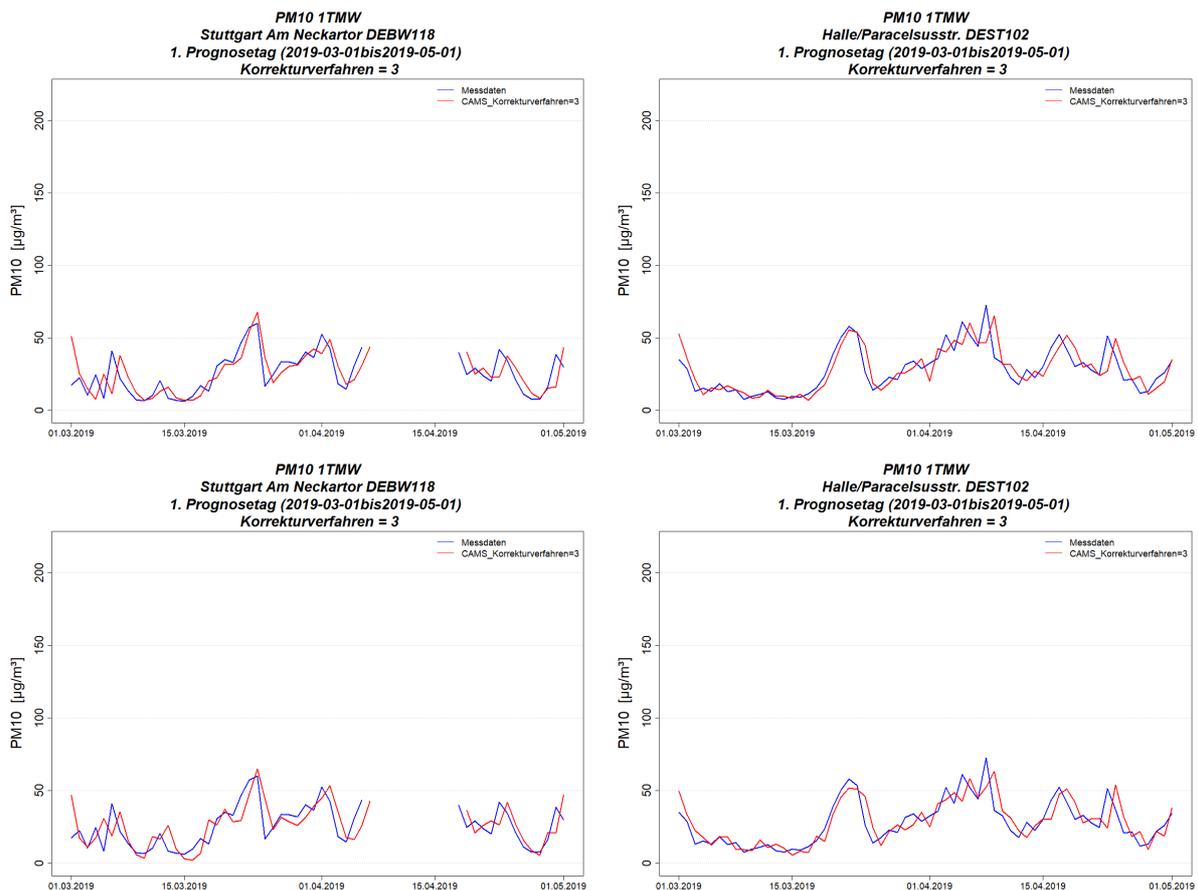
Abbildung 52: Scatterplots der PM₁₀-Tagesmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur (n = 26), 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: Station mit der größten Verbesserung des Korrelationskoeffizienten (DEBW118). Rechts: Station mit der größten Verbesserung der Hit Rate (DEST102).



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 53 zeigt die zugehörigen Zeitreihen-Plots der Tagesmittelwerte, wieder links für die Station DEBW118 und rechts für die Station DEST102. Dargestellt sind beispielhaft die Monate März und April 2019. Die Konzentrationsverlauf wird schon durch die reine Hybrid-Vorhersage recht gut getroffen und erfährt durch die Wochentagskorrektur keine wesentliche Verbesserung. An der Station DEBW118 ist in der zweiten und dritten Märzwoche tendenziell eher eine Verschlechterung durch die Wochentagskorrektur zu beobachten.

Abbildung 53: Zeitreihen der PM₁₀-Tagesmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosezeitraum, März/April 2019. Links: Station mit der größten Verbesserung des Korrelationskoeffizienten (DEBW118). Rechts: Station mit der größten Verbesserung der Hit Rate (DEST102). Wochenenden im März: 02./03., 09./10., 16./17., 23./24., 30./31. Wochenenden im April: 06./07., 13./14., 20./21., 27./28.

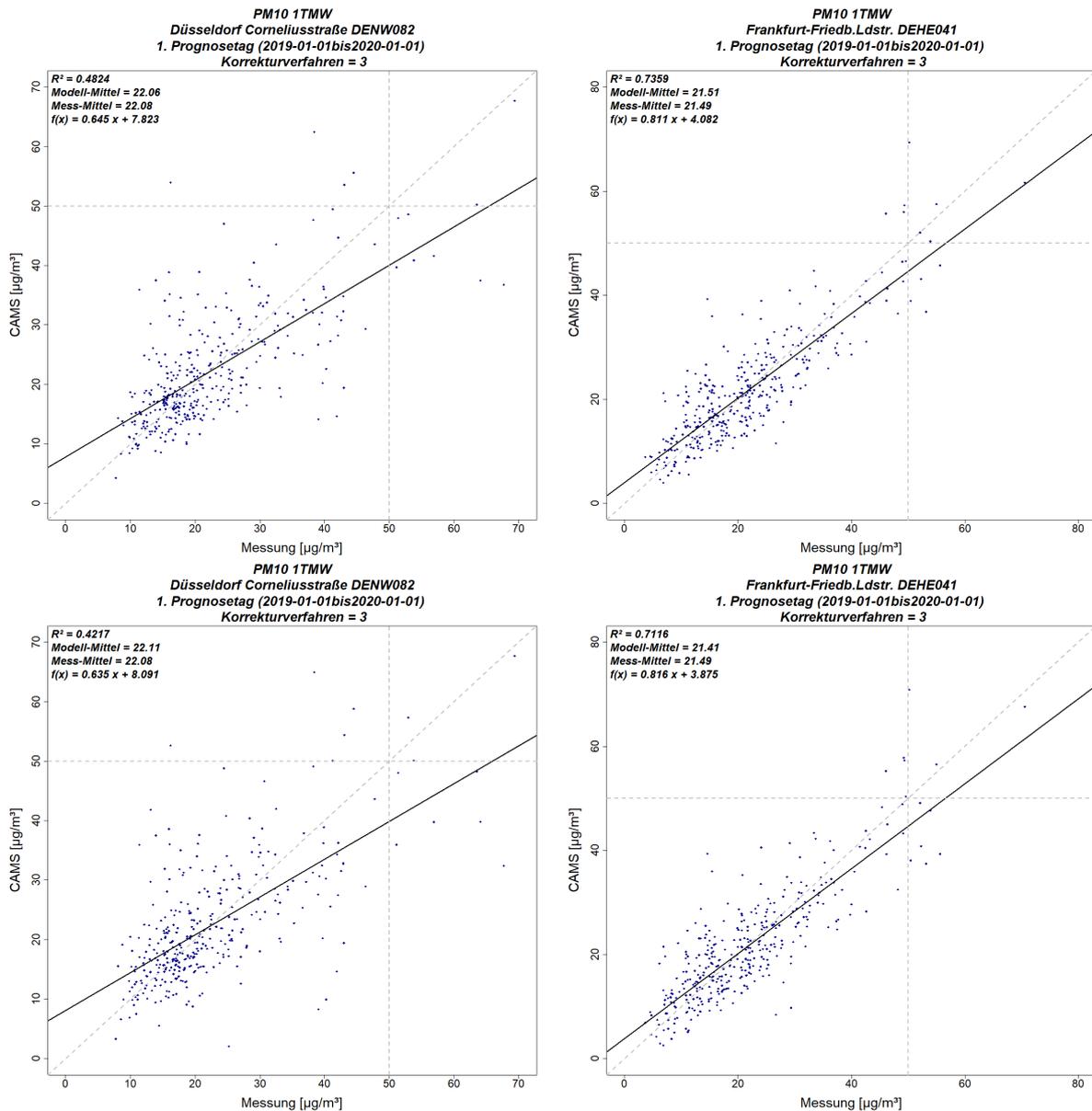


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 54 zeigt im Gegensatz zu Abbildung 52 die beiden Stationen mit der größten Verringerung des Korrelationskoeffizienten (links, DENW082 Düsseldorf Corneliusstraße) und der größten Verringerung der Hit Rate (rechts, DEHE041 Frankfurt-Friedberger Landstraße) durch die Wochentagskorrektur.

Die größte Verringerung des Korrelationskoeffizienten liegt demnach bei PM₁₀-Spot-Stationen bei knapp 5 Prozentpunkten, von knapp 0.70 auf 0.65 an der Station DENW082. Die größte Verringerung der Hit Rate beträgt rund 22 Prozentpunkte, von 55.6 % auf 33.3 % an der Station DEHE041, wobei die Anzahl der dort im Jahr 2019 beobachteten Überschreitungen von 50 µg/m³ 9 beträgt. Die FAR steigt dabei an dieser Station minimal von 0.8 % auf 1.1 %.

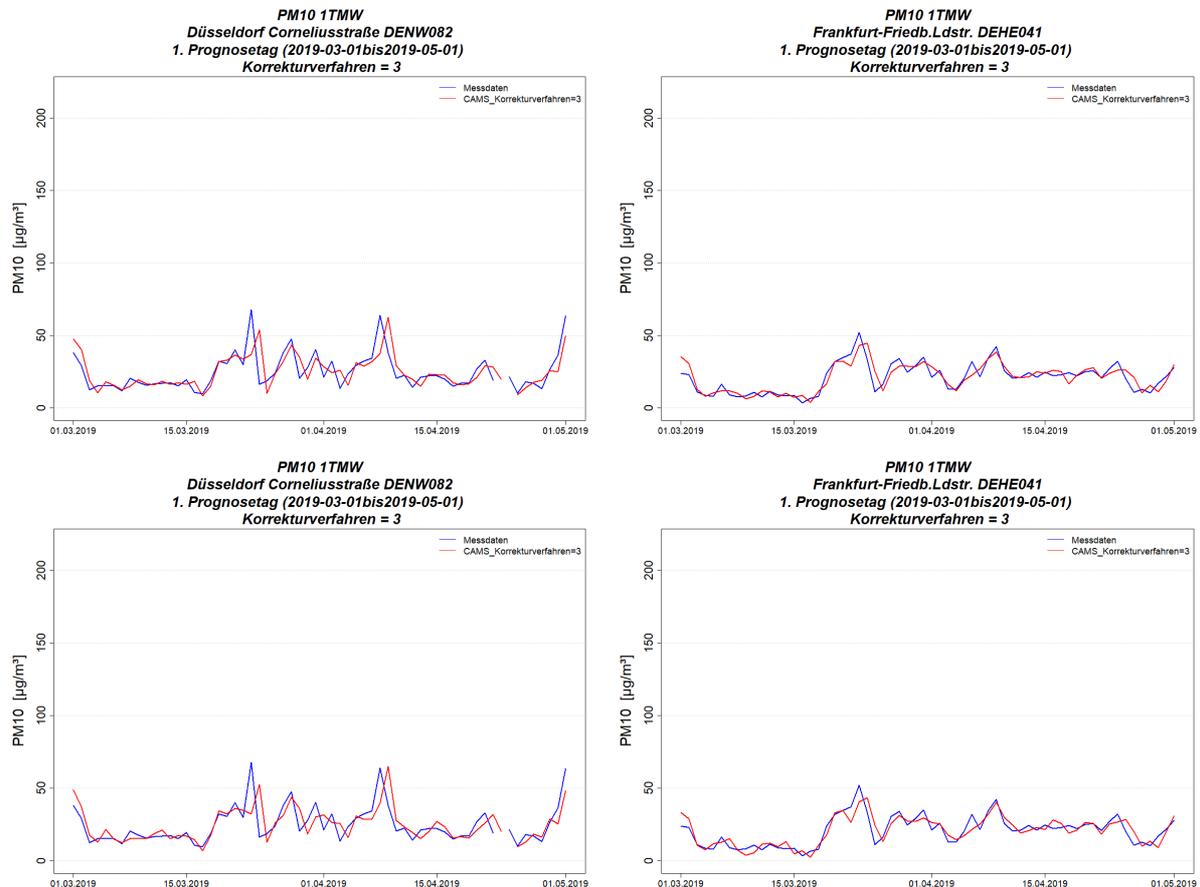
Abbildung 54: Scatterplots der PM₁₀-Tagesmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: Station mit der größten Verringerung des Korrelationskoeffizienten (DENW082). Rechts: Station mit der größten Verringerung der Hit Rate (DEHE041).



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 55 sind die zugehörigen Zeitreihen-Plots der Tagesmittelwerte dargestellt, wieder links für die Station DENW082 und rechts für die Station DEHE041. Dargestellt sind die gleichen Monate März und April 2019 wie in Abbildung 53. Auch an diesen beiden Stationen wird der Konzentrationsverlauf schon durch die reine Hybrid-Vorhersage recht gut getroffen, und die Wochentagskorrektur bringt keine wesentliche Verbesserung.

Abbildung 55: Zeitreihen der PM₁₀-Tagesmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, März/April 2019. Links: Station mit der größten Verringerung des Korrelationskoeffizienten (DENW082). Rechts: Station mit der größten Verringerung der Hit Rate (DEHE041). Wochenenden im März: 02./03., 09./10., 16./17., 23./24., 30./31. Wochenenden im April: 06./07., 13./14., 20./21., 27./28.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

8.2 NO₂: Verkehrsstationen

Tabelle 16 zeigt die mit der Testumgebung berechneten statistischen Kennwerte für die mit der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur korrigierten CAMS-Prognosen für NO₂-Stundenmittelwerte jeweils als Median über alle entsprechenden statistischen Kennwerte an den betrachteten Verkehrsstationen für das Bezugsjahr 2019. Dargestellt sind wie für PM₁₀ (Tabelle 14) die Mediane für die Mittelungszeiträume $n = 1, 2, 8, 12, 26$ und 52 Wochen, für die die Wochentagskorrekturfaktoren berechnet wurden (vgl. Abschnitt 4.2). Auf die Darstellung der Ergebnisse für die Mittelungszeiträume $n = 3, 4$ und 6 Wochen wurde hier aus Gründen der Übersichtlichkeit ebenfalls verzichtet, zumal sich die Werte auch für NO₂ im Wesentlichen zwischen den Ergebnissen für $n = 2$ Wochen und $n = 8$ Wochen einsortieren.

Wird $n = 1$ Woche gesetzt, dann liegen wie bei PM₁₀ Mittelwert, Maximalwert und Standardabweichung für die wochentagskorrigierte Hybrid-Vorhersage im Median höher als für die reine Hybrid-Vorhersage (Tabelle 13) und für die Messwerte. Der Korrelationskoeffizient sinkt gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage im Median von 0.55 auf 0.48, der MFB steigt im Median deutlich von -0.7 % auf -12.2 % an, und RMSE, BIAS und FGE nehmen ebenfalls zu. Hit Rate und FAR steigen im Median beide. Für den Schwellenwert von 40 µg/m³ geht die leichte

Erhöhung der Hit Rate von knapp 60 % auf knapp 61 % mit einer Erhöhung der FAR von 20.6 % auf 25 % einher, während sich für den Schwellenwert von $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ die Hit Rate von knapp 18 % auf 22.5 % erhöht und die FAR minimal von 0.26 % auf 0.87%.

Bei $n = 2$ Wochen sind die Medianwerte von Mittelwert, Maximalwert und Standardabweichung gegenüber $n = 1$ Woche wie bei PM_{10} deutlich reduziert. Der Korrelationskoeffizient steigt auf 0.53 und damit bereits fast auf das Niveau der reinen Hybrid-Vorhersage an. RMSE, BIAS, MFB und FGE sinken, ebenso die FAR, während die Hit Rate für beide betrachteten Schwellenwerte noch etwas ansteigt. Damit sind die Medianwerte gegenüber $n = 1$ Woche bereits deutlich verbessert, wenn auch bis auf die Hit Rate noch immer etwas schlechter als bei der reinen Hybrid-Vorhersage.

Mit steigendem Mittelungszeitraum steigt die Vorhersagegüte der wochentagskorrigierten Hybrid-Vorhersage gegenüber $n = 1$ Woche weiter an, soweit sie mit Hilfe der statistischen Kennwerte beurteilt wird. Die günstigsten Kennwerte ergeben sich im Median für $n = 52$ Wochen, bis auf den Mittelwert und den BIAS, die ihr Minimum bei den wochentagskorrigierten Hybrid-Vorhersagen bei $n = 4$ Wochen bzw. $n = 6$ bis $n = 8$ Wochen haben. Die Kennwerte für $n = 26$ Wochen unterscheiden sich im Median nur geringfügig von denen für $n = 52$ Wochen. Der Korrelationskoeffizient beträgt 0.59 für $n = 12$ und $n = 26$ Wochen sowie 0.6 für $n = 52$ Wochen und ist damit höher als der Korrelationskoeffizient von 0.55 für die reine Hybridvorhersage. Der RMSE und die Hit Rates für die beiden Schwellenwerte profitieren ebenfalls von der Wochentagskorrektur. Die FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ist ab $n = 26$ Wochen im Median geringfügig niedriger als für die reine Hybrid-Vorhersage, während die FAR für den Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ mit 0.36 im Median nur geringfügig höher ist als für die reine Hybrid-Vorhersage.

Tabelle 16: NO₂-Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die mit der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur korrigierten CAMS-Prognosen (CAMS HV), Wochentagskorrektur mit einem Mittelungszeitraum über 1, 2, 8, 12, 26 und 52 Wochen (WD1, ..., WD52), jeweils 1. Prognostag, Median über alle Verkehrsstationen, 2019

Metrik	CAMS HV WD1	CAMS HV WD2	CAMS HV WD8	CAMS HV WD12	CAMS HV WD26	CAMS HV WD52
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	34.25	34.25	34.25	34.25	34.25	34.25
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	34.78	34.55	34.44	34.46	34.48	34.52
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	133.08	133.08	133.08	133.08	133.08	133.08
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	160.26	148.40	139.46	139.39	139.00	139.00
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.93	17.93	17.93	17.93	17.93	17.93
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	22.80	21.23	19.31	19.18	19.06	19.01
Korrelation [-]	0.48	0.53	0.58	0.59	0.59	0.60
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	21.26	19.18	16.97	16.63	16.48	16.44
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.51	0.27	0.14	0.16	0.21	0.25
MFB [%]	-12.15	-8.86	-4.31	-3.75	-3.11	-2.85
FGE [%]	57.49	51.13	43.03	41.91	41.13	40.86
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	2786	2786	2786	2786	2786	2786
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	60.79	61.85	62.67	62.81	62.73	63.08
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	25.00	23.90	21.04	20.77	20.40	20.29
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	23	23	23	23	23	23
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	22.47	22.65	20.00	20.00	20.29	20.29
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.87	0.53	0.39	0.37	0.36	0.36

¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

In Tabelle 17 sind die mit dem FAIRMODE-DELTA-Tool berechneten Modellierungsqualitäts-Indikatoren MQI_{HD} und MQI_{HD} sowie MQI_{Forecast} für die reine Hybrid-Vorhersage sowie die wochentagskorrigierte Hybrid-Vorhersage mit Mittelungszeiträumen von $n = 1, 2, 3, 4, 6, 8, 12, 26$ und 52 Wochen zusammengestellt.

Im Gegensatz zu PM₁₀ (Tabelle 15) erfüllen für NO₂ nur MQI_{HD} und MQI_{YR} sowohl für die reine Hybrid-Vorhersage als auch für alle wochentagskorrigierten Varianten die Anforderung des Modellierungsqualitäts-Ziels. Dabei ergeben sich für MQI_{HD} für $n = 1$ Woche bis $n = 8$ Wochen höhere Werte und ab $n = 12$ Wochen niedrigere und damit bessere Werte als für die reine Hybrid-Vorhersage. Der Minimalwert des MQI_{HD} ergibt sich für $n = 52$ Wochen mit 0.707 , wobei der MQI_{HD} für $n = 26$ Wochen mit 0.709 nur geringfügig höher liegt. Der MQI_{YR} liegt für alle wochentagskorrigierten Varianten höher als für die reine Hybrid-Vorhersage, aber insge-

samt mit einem Maximalwert von 0.075 für $n = 1$ Woche auf einem sehr niedrigen Niveau. Der Minimalwert ergibt sich hier für $n = 8$ Wochen, danach steigen die Werte mit steigendem n wieder an.

Das MQO_Forecast wird von der reinen Hybrid-Vorhersage knapp erfüllt (vgl. Abschnitt 7.4). Für $n = 1$ bis $n = 8$ Wochen ergeben sich MQI_Forecast über 1, das MQI_Forecast ist demnach hier nicht erfüllt. Ab $n = 12$ Wochen liegen die MQI_Forecast wieder unter 1 und außerdem niedriger als für die reine Hybrid-Vorhersage. Der Minimalwert des MQI_Forecast ergibt sich für $n = 52$ Wochen mit 0.975, der MQI_Forecast für $n = 26$ Wochen liegt mit 0.977 nur knapp darüber.

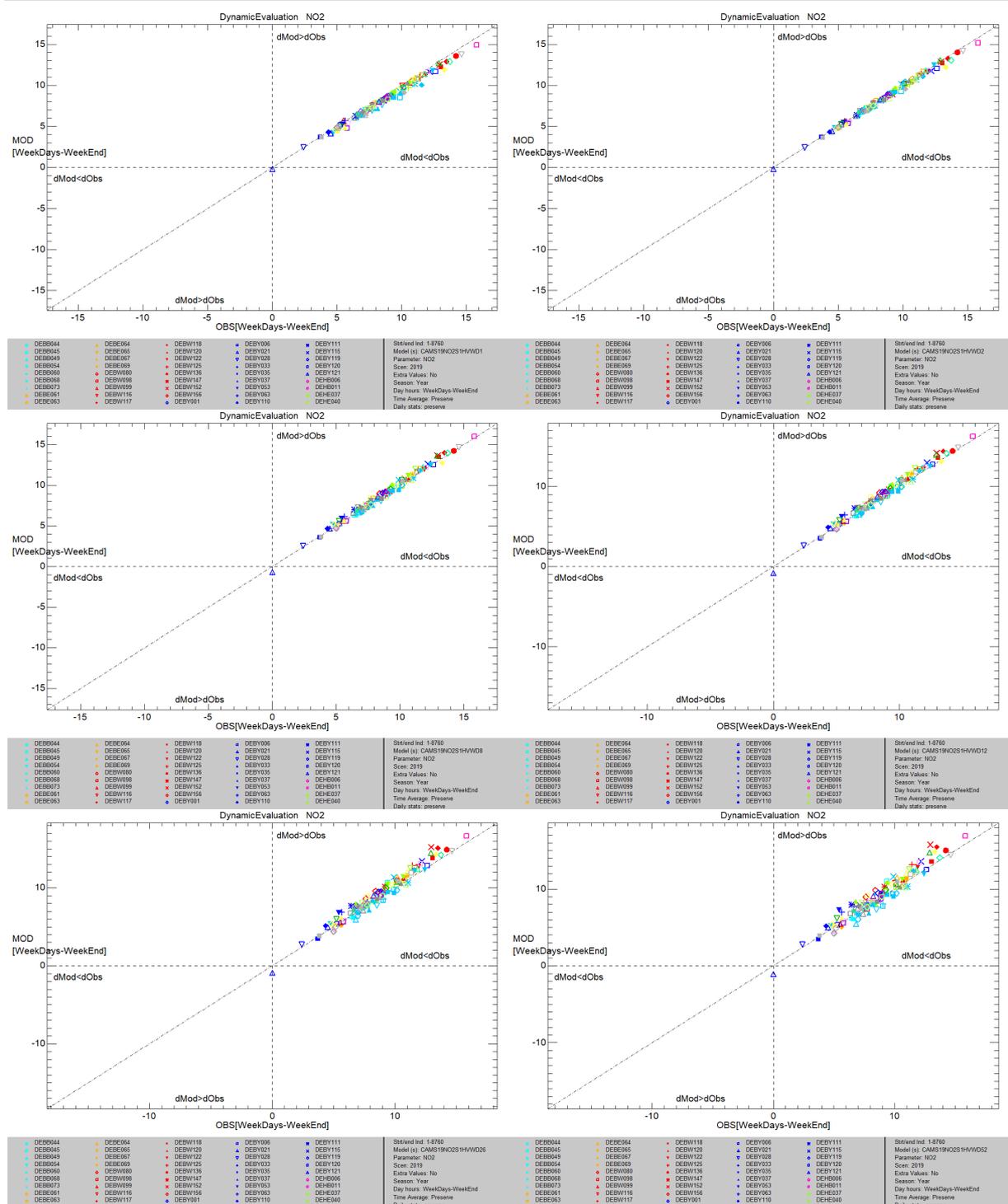
Tabelle 17: NO₂-Stundenmittelwerte: MQI_HD, MQI_YR und MQI_Forecast für die Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentagskorrektur, Wochentagskorrekturfaktor als Mittelwert über 1, 2, 3, 4, 6, 8, 12, 26 und 52 Wochen

Anzahl Wochen des Mittelungszeitraums	MQI_HD	MQI_YR	MQI_Forecast
ohne Wochentagskorrektur	0.729	0.007	0.994
1	0.903	0.075	1.252
2	0.822	0.042	1.122
3	0.789	0.028	1.075
4	0.764	0.021	1.049
6	0.744	0.020	1.015
8	0.733	0.019	1.002
12	0.716	0.021	0.986
26	0.709	0.027	0.977
52	0.707	0.032	0.975

Abbildung 56 zeigt die dynamische Evaluierung für den Zeitbezug Wochentag – Wochenende für die NO₂-Verkehrsstationen 2019, jeweils für den 1. Prognosetag. Dargestellt sind wie für PM₁₀ die Ergebnisse für die wochentagskorrigierte Hybrid-Vorhersage mit $n = 1, 2, 8, 12, 26$ und 52 Wochen. Auch für die NO₂-Verkehrsstationen zeigen alle sechs Plots eine deutlich bessere Verteilung der Stationspunkte entlang der 1:1-Diagonalen und damit eine deutlich bessere Übereinstimmung der modellierten mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Wochentag und Wochenende mit den mittleren Differenzen der Messwerte als die reine CAMS-Prognose oder die reine Hybrid-Vorhersage (vgl. Abbildung 50, unten).

Dabei liegen wie bei PM₁₀ die Stationspunkte für $n = 2$ Wochen (Abbildung 56, oben rechts) am dichtesten an der 1:1-Diagonalen, danach wird die Streuung um die Diagonale mit steigendem n stärker, wobei die generelle Ausrichtung der Punktwolke entlang der Diagonalen erhalten bleibt. Am stärksten ist die Streuung für $n = 52$ Wochen (Abbildung 56, unten rechts).

Abbildung 56: Dynamische Evaluierung Wochentag – Wochenende an den NO₂-Verkehrsstationen für die mit der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur korrigierten CAMS-Prognosen, 1. Prognostag, Bezugsjahr 2019. Mittelungszeitraum der Wochentagskorrektur: 1 bzw. 2 Wochen (oben); 8 bzw. 12 Wochen (Mitte); 26 bzw. 52 Wochen (unten).



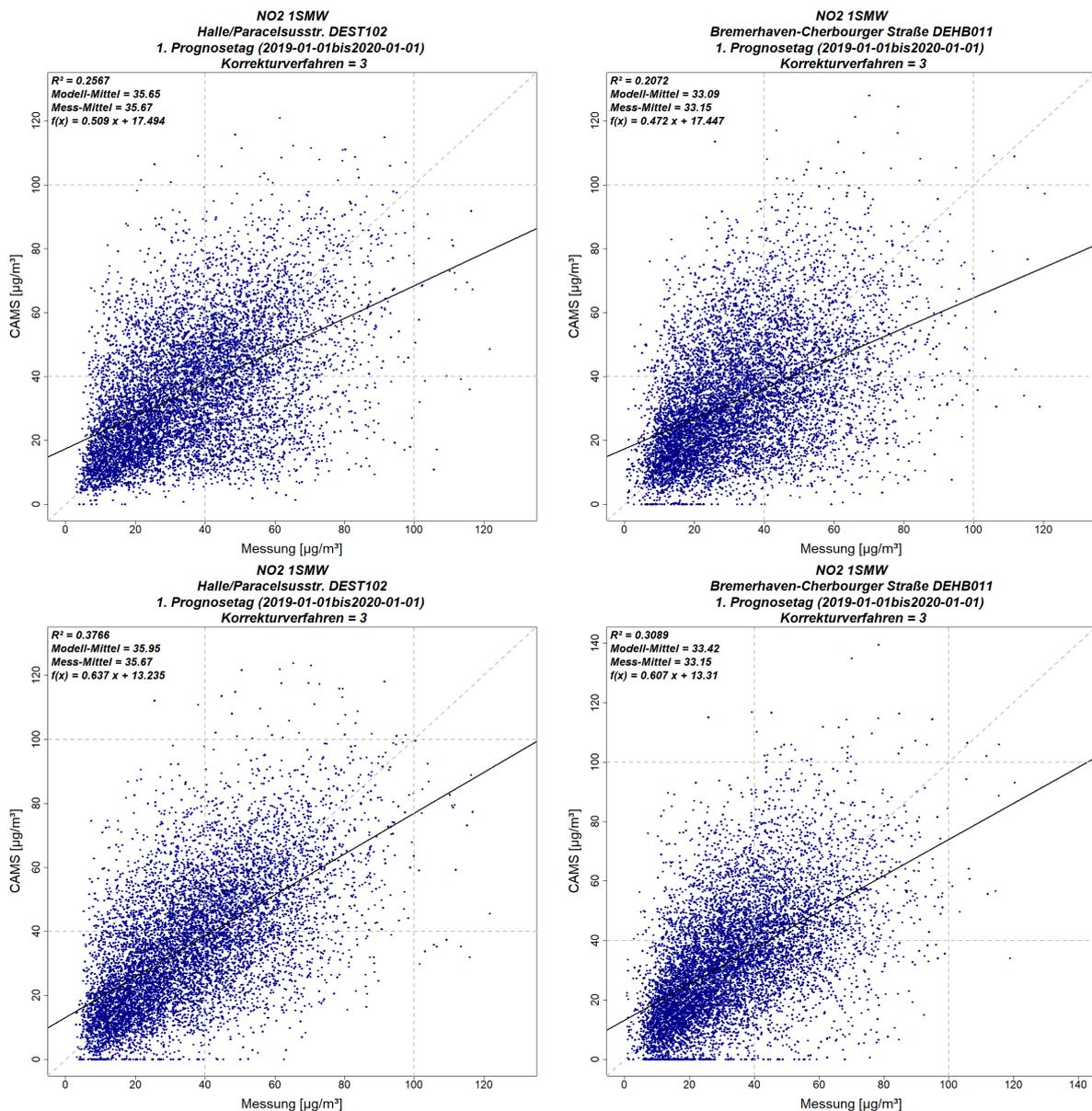
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Auf Basis der vorgestellten Ergebnisse wurde für die weiteren Arbeiten im Projekt ein Mittelungszeitraum von $n = 26$ Wochen zur Bestimmung der Wochentagskorrekturfaktoren gewählt (siehe Abschnitt 8.3). In Abbildung 57 sind die Scatterplots für zwei Stationen zusammen-

gestellt, oben für die reine Hybrid-Vorhersage und unten für die Wochentagskorrektur mit $n = 26$ Wochen. An der einen Station (links, DEST102 Halle/Paracelsusstraße) wurde die größte Verbesserung des Korrelationskoeffizienten und an der anderen Station (rechts, DEHB011 Bremerhaven-Cherbourger Straße) die größte Verbesserung der Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ durch die Wochentagskorrektur erzielt.

Die größte Verbesserung des Korrelationskoeffizienten liegt demnach bei NO_2 -Verkehrsstationen bei 10 Prozentpunkten, von 0.51 auf 0.61 an der Station DEST102. Die größte Verbesserung der Hit Rate beträgt 9 Prozentpunkte, von 52.4 % auf 61.4 % an der Station DEHB011. Die FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ sinkt dabei an dieser Station von 21.5 % auf 20.7 %. An beiden Stationen steigt die Steigung der Regressionsgeraden durch die Wochentagskorrektur an.

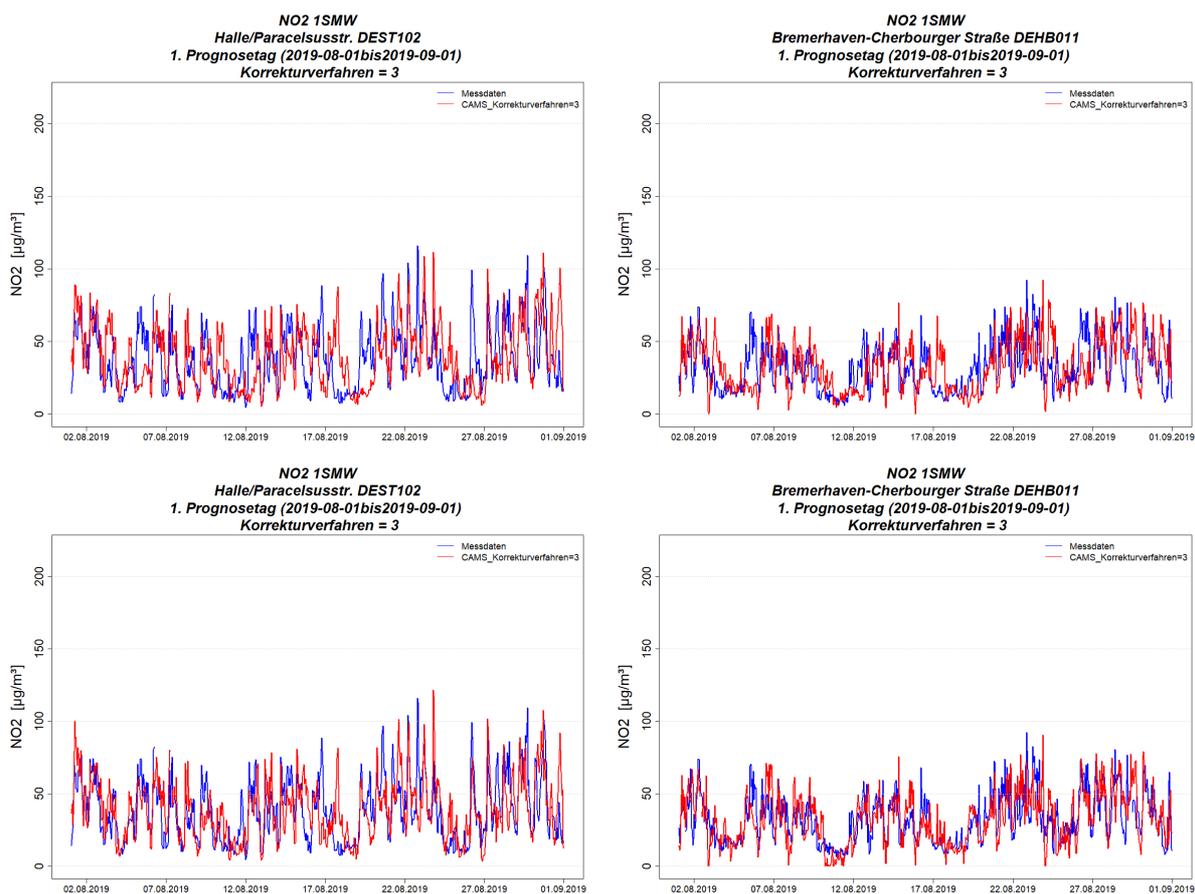
Abbildung 57: Scatterplots der NO_2 -Stundenmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Links: Station mit der größten Verbesserung des Korrelationskoeffizienten (DEST102). Rechts: Station mit der größten Verbesserung der Hit Rate (DEHB011).



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 58 zeigt die zugehörigen Zeitreihen-Plots der NO₂-Stundenmittelwerte, wieder links für die Station DEST102 und rechts für die Station DEHB011. Dargestellt ist beispielhaft der Monat August 2019. Die Konzentrationsverläufe wird für die reine Hybrid-Vorhersage grundsätzlich gut getroffen, jedoch mit dem typischen zeitlichen Verzug von einem Tag (siehe Abschnitt 7.5). Durch die Wochentagskorrektur werden an beiden hier gezeigten Stationen die Konzentrationen an den Samstagen gedämpft und an den Montagen erhöht, was im Regelfall zu einer besseren Erfassung der gemessenen Werte an diesen beiden Wochentagen führt.

Abbildung 58: Zeitreihen der NO₂-Stundenmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, August 2019. Links: Station mit der größten Verbesserung des Korrelationskoeffizienten (DEST102). Rechts: Station mit der größten Verbesserung der Hit Rate für den Schwellenwert von 40 µg/m³ (DEHB011). Wochenenden im August: 03.08./04.08., 10.08./11.08., 17.08./18.08., 24.08./25.08., 31.08./01.09.



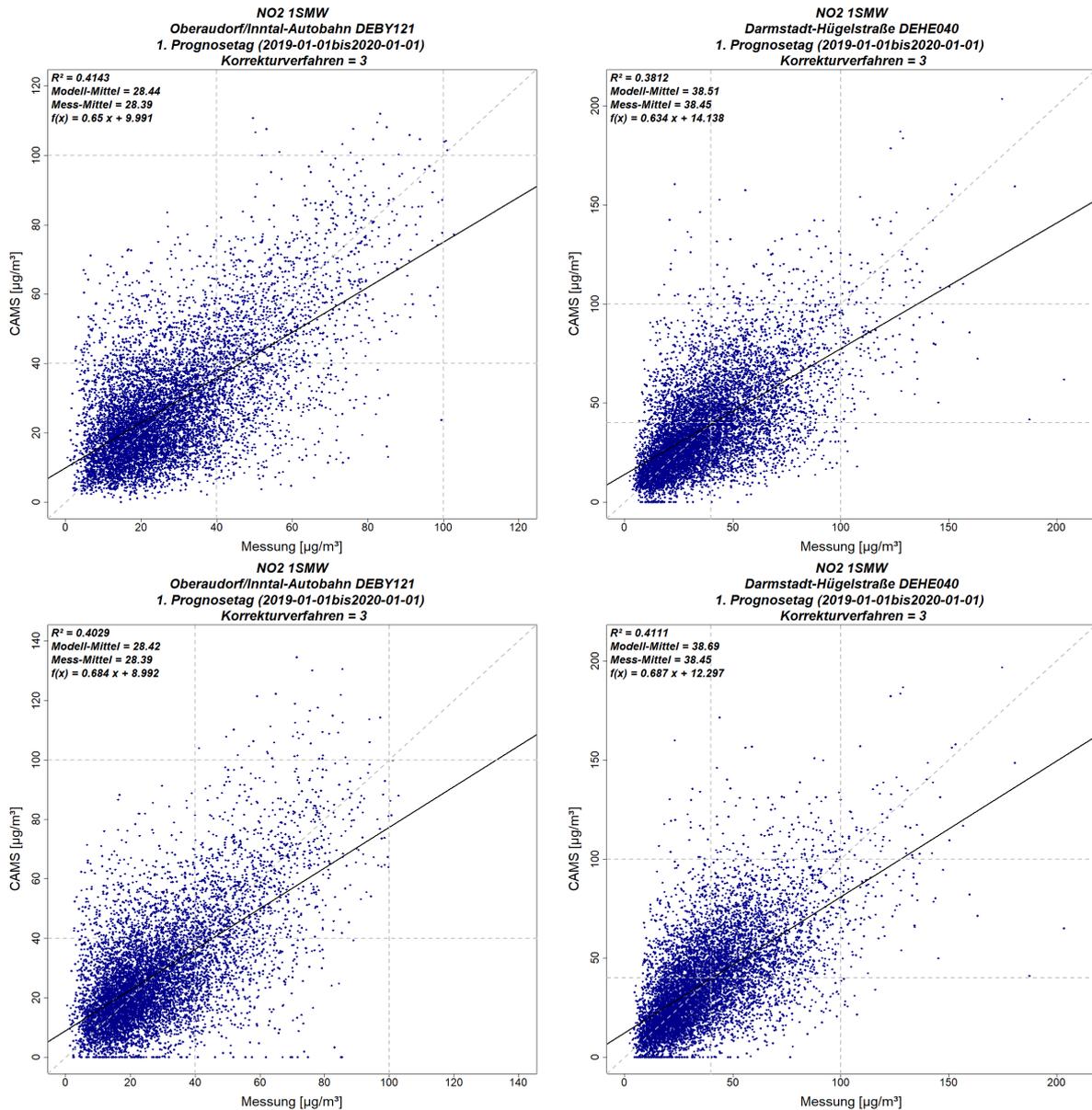
Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 59 zeigt die beiden Stationen mit der größten Verringerung des Korrelationskoeffizienten und der Hit Rate für den Schwellenwert 40 µg/m³ (links, DEBY121 Oberaudorf/Inntal-Autobahn) sowie dem größten Anstieg der False Alarm Rate für den Schwellenwert 40 µg/m³ (rechts, DEHE040 Darmstadt-Hügelstraße) durch die Wochentagskorrektur mit $n = 26$.

Die größte Verringerung des Korrelationskoeffizienten liegt demnach bei NO₂-Verkehrsstationen bei knapp einem Prozentpunkt, von 0.64 auf 0.63 an der Station DEBY112. An dieser Station kommt es auch zur größten Verringerung der Hit Rate, diese sinkt minimal von 61.5 % auf 61.4 %, während die FAR konstant bei 10.2 % bleibt. Der größte Anstieg der FAR betrifft die

Station DEHE040, an der sich die FAR durch die Wochentagskorrektur von 21.0 % auf 22.3 % erhöht. Gleichzeitig steigt die Hit Rate an dieser Station von 66.2 % auf 71.2 %.

Abbildung 59: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Links: Station mit der größten Verringerung des Korrelationskoeffizienten und der Hit Rate (DEBY121). Rechts: Station mit dem größten Anstieg der FAR (DEHE040).

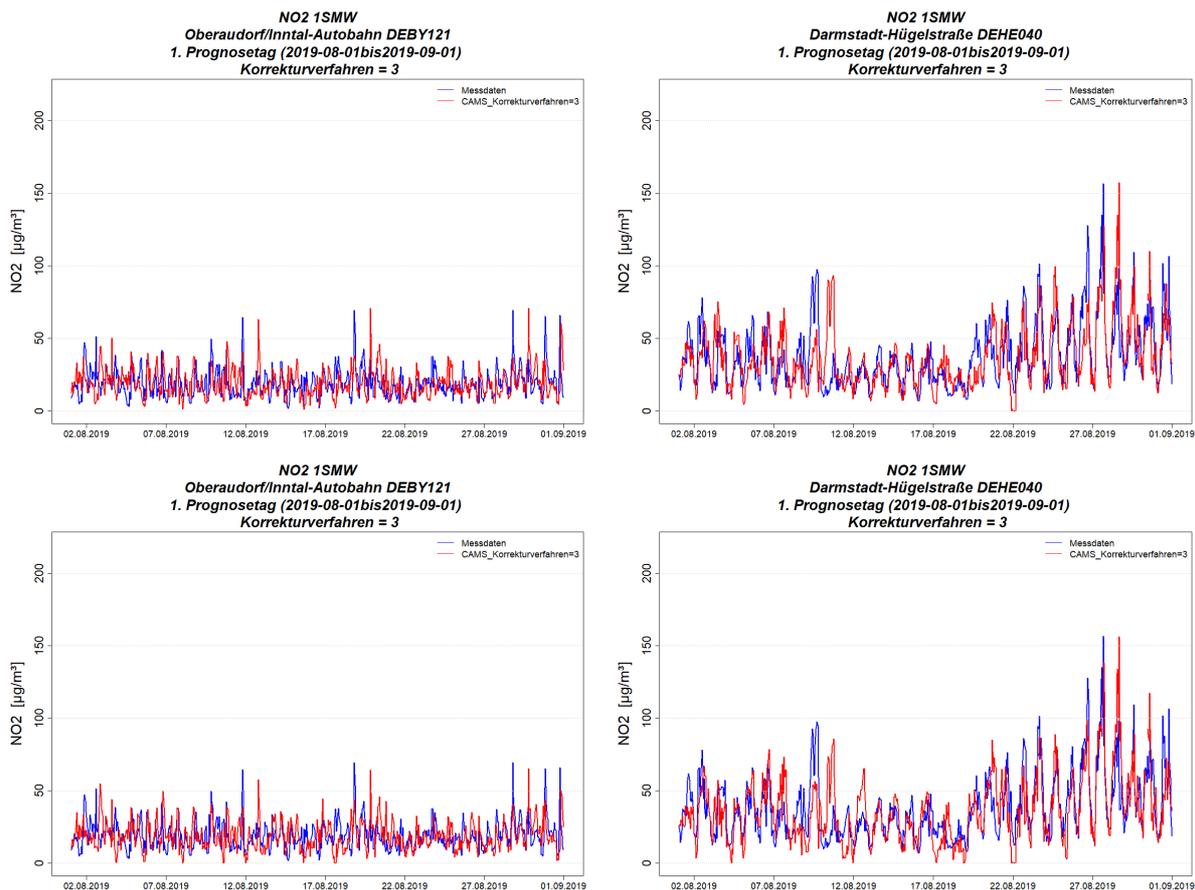


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 60 sind die zugehörigen Zeitreihen-Plots der Stundenmittelwerte dargestellt, wieder links für die Station DEBY121 und rechts für die Station DEHE040. Dargestellt ist der gleiche Monat August 2019 wie in Abbildung 58. An beiden Stationen ist für die reine Hybrid-Vorhersage wieder der typische zeitliche Verzug der Konzentrationsspitzen von einem Tag zu erkennen. Die Station DEBY121 ist direkt neben der Inntal-Autobahn installiert und zeigt in den Messwerten nicht den typischen innerstädtischen Wochengang mit niedrigeren Konzentrationen am Wochenende und höheren Konzentrationen unter der Woche, wie er z. B. in Abbildung 58 gut zu beobachten ist. Entsprechend führt die Wochentagskorrektur hier auch nur in Einzel-

fällen zu Verbesserungen in der Konzentrationsprognose. Trotzdem hat die Wochentagskorrektur über die Zeitreihe des Jahres betrachtet nur geringen negativen Einfluss auf die Vorhersagegüte im Vergleich zur reinen Hybrid-Vorhersage, wie anhand Abbildung 59 gezeigt wurde. DEHE040 hingegen ist eine verkehrsnahen Messstation mit einem typischen innerstädtischen Wochengang. Dort steigt die FAR zwar um 1.3 Prozentpunkte an (vgl. Abbildung 59), aber gleichzeitig verbessert die Wochentagskorrektur den prognostizierten Wochengang in vielen Fällen, wie in Abbildung 60 z. B. an den Tagen 03.08. bis 05.08.2019 oder an den beiden Montagen 19.08.2019 und 26.08.2019 zu erkennen ist und wie sich auch in der höheren Hit Rate gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage zeigt.

Abbildung 60: Zeitreihen der NO₂-Stundenmittelwerte, Hybrid-Vorhersage ohne (oben) und mit (unten) Wochentagskorrektur, 1. Prognosetag, August 2019. Links: Station mit der größten Verringerung des Korrelationskoeffizienten und der Hit Rate (DEBY121). Rechts: Station mit dem größten Anstieg der FAR (DEHE040). Wochenenden im August: 03.08./04.08., 10.08./11.08., 17.08./18.08., 24.08./25.08., 31.08./01.09.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

8.3 Fazit

Die Auswertung der Ergebnisse in Abschnitt 8.1 und Abschnitt 8.2 haben gezeigt, dass die Vorhersagegüte bei der Wochentagskorrektur für beide betrachteten Schadstoffe mit steigendem Mittelungszeitraum n ansteigt. Dabei ergeben sich für PM₁₀ ab $n = 8$ Wochen nur noch geringfügige Änderungen in den statistischen Kennwerten und den verschiedenen Modellierungsqualitäts-Indikatoren. Für NO₂ steigt die Vorhersagegüte bis $n = 52$ Wochen mit steigendem n an, wobei die Unterschiede zu $n = 26$ Wochen in den Medianen der statistischen

Kennwerte und den Modellierungsqualitäts-Indikatoren gering sind und auch $n = 12$ Wochen noch gute Ergebnisse liefert. Gleichzeitig ist das Minimum für NO_2 auf $n = 12$ Wochen festgelegt, weil für kleinere n der MQI_Forecast größer als 1 ist und damit das Modellierungsqualitäts-Ziel, wie es im FAIRMODE-DELTA-Tool definiert ist, nicht erreicht wird. Auf der anderen Seite zeigt die dynamische Auswertung der mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Wochentag und Wochenende, dass für beide Schadstoffe für $n = 52$ Wochen die Streuung der Stationspunkte um die 1:1-Diagonale deutlich stärker ist als für niedrigere betrachtete n . Als Empfehlung für beide Schadstoffe wird daraus abgeleitet, dass ein Mittelungszeitraum über mindestens $n = 12$, besser $n = 26$ Wochen zur Bestimmung der Wochentagskorrekturfaktoren gewählt werden sollte.

In der Anwendung zeigt sich, dass die Wochentagskorrektur bei PM_{10} -Spot-Stationen zumindest nicht zu einer relevanten Verbesserung der Vorhersagegüte führt. Selbst für lange Mittelungszeiträume n ist hier der Korrelationskoeffizient der reinen Hybrid-Vorhersage im Median besser als für die wochentagskorrigierte Vorhersage, was ebenso wie die gezeigten Zeitreihen-Beispiele darauf hinweist, dass die Wochentagskorrektur nicht dazu führt, dass der so korrigierte prognostizierte zeitliche Konzentrationsverlauf den gemessenen Konzentrationsverlauf besser erfasst als bei der reinen Hybrid-Vorhersage ohne Wochentagskorrektur. Dies wird durch die Auswertungen des FAIRMODE-DELTA-Tools unterstrichen, bei denen die niedrigsten Modellierungsqualitäts-Indikatoren für die reine Hybrid-Vorhersage ermittelt werden. Zwar weisen die statistischen Auswertungen auf eine Verbesserung der Hit Rate durch die Wochentagskorrektur hin, aber aufgrund der geringen Anzahl gemessener Überschreitungen kann dieses Ergebnis nur eingeschränkt zur Bewertung herangezogen werden, insbesondere, was die Höhe der Verbesserung betrifft. Eine Verwendung der Wochentagskorrektur im Zusammenhang mit der Hybrid-Vorhersage wird daher für PM_{10} -Spot-Stationen nicht empfohlen.

Bei NO_2 hingegen führt die Anwendung der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur an Verkehrsstationen mit einem ausgeprägten Wochengang im Konzentrationsverlauf bei ausreichendem Mittelungszeitraum ($n \geq 12$ Wochen) zu konkreten Verbesserungen gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage, zum einen, was die statistischen Kennwerte und die Modellierungsqualitäts-Indikatoren angeht, und zum anderen, was direkt den zeitlichen Konzentrationsverlauf an Wochenenden und dem darauffolgenden Montag betrifft. Die Verwendung der Wochentagskorrektur im Zusammenhang mit der Hybrid-Vorhersage mit $n_{\text{Vorlauf}} = 1$ Tag wird daher für verkehrsnahen NO_2 -Messstationen grundsätzlich empfohlen.

9 Evaluierung der Feiertagskorrektur

Wie in Abschnitt 4.3 gezeigt, weisen die mittleren Konzentrationsniveaus der NO₂-Tagesmittelwerte an verkehrsnahen Messstationen für die Tagestypen „Feiertage“, „Ferientage“ und „Normaltage“ über alle Bundesländer eine klare Tendenz auf, dass das Konzentrationsniveau an Feiertagen niedriger als an Ferientagen und an Ferientagen wiederum niedriger als an Normaltagen ist. Die Unterschiede zum Normaltag sind dabei an den Wochentagen größer als an den Wochenenden. Eine entsprechende Auswertung der NO₂-CAMS-Prognosedaten an den verkehrsnahen Messstandorten zeigt, dass die für die NO₂-Messdaten beschriebene Tendenz der Konzentrationsniveaus in Abhängigkeit vom Tagestyp von den CAMS-Daten nicht wiedergegeben wird.

Daher wurde analog zur Wochentagskorrektur (Abschnitt 4.2) die in Abschnitt 4.3 beschriebene Feiertagskorrektur entwickelt, die auf Feiertage unter der Woche (Montag bis Freitag) angewendet wird und diese Feiertage wie einen Sonntag aus der Wochentagskorrektur behandelt. Im Folgenden wird ihr Einfluss auf die NO₂-Prognose an verkehrsnahen Messstationen untersucht. Der Einfluss auf die PM₁₀-Prognose wird hingegen nicht untersucht, da die Auswertungen der mittleren Konzentrationsniveaus der Tagesmittelwerte der PM₁₀-Messdaten in Abschnitt 4.3 keine einheitlichen Tendenzen hinsichtlich der Verhältnisse der Konzentrationsniveaus der einzelnen Tagestypen zueinander ergeben haben.

9.1 NO₂: Verkehrsstationen

Tabelle 18 zeigt die mit der Testumgebung berechneten statistischen Kennwerte für die mit der reinen Hybrid-Vorhersage sowie mit der Hybrid-Vorhersage mit Feiertagskorrektur korrigierten CAMS-Prognosen für NO₂-Stundenmittelwerte jeweils als Median über alle entsprechenden statistischen Kennwerte an den betrachteten Verkehrsstationen für das Bezugsjahr 2019. Dargestellt sind die Mediane für die Mittelungszeiträume $n = 1, 2, 12$ und 26 Wochen, für die die Feiertagskorrekturfaktoren berechnet wurden. Wie in Abschnitt 4.1 begründet, wurden für die Feiertagskorrektur und die damit verbundenen Auswertungen negative korrigierte Modellwerte nicht mehr durch die untere Schranke von $0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ersetzt, sondern durch die Werte der unkorrigierten CAMS-Prognosen. Entsprechend können sich die Ergebnisse der Auswertungen für die reine Hybrid-Vorhersage und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur, insofern sie in diesem Kapitel zu Vergleichszwecken herangezogen werden, geringfügig von den entsprechenden Auswertungen in Kapitel 7 und Kapitel 8 unterscheiden.

Die Werte in Tabelle 18 zeigen, dass der Einfluss der Feiertagskorrektur bezogen auf die Betrachtung eines ganzen Jahres gering ist. Entsprechend wurde gegenüber der bisherigen Darstellung die Anzahl der Nachkommastellen erhöht, um einzelne Effekte besser sichtbar zu machen.

Die Anwendung der Feiertagskorrektur führt demnach gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage im Median zu einer leichten Verbesserung des Korrelationskoeffizienten und des RMSE, insbesondere für $n = 12$ und $n = 26$ Wochen. Der MFB wird durch die Feiertagskorrektur größer, wobei der maximale Median für $n = 26$ Wochen auftritt und mit -0.67 sehr niedrig liegt. Der FGE wird durch die Feiertagskorrektur ebenfalls etwas größer, erreicht aber für $n = 26$ Wochen fast wieder den Wert der reinen Hybrid-Vorhersage. Hit Rate und False Alarm Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ sind für $n = 12$ und $n = 26$ Wochen im Median geringfügig besser als für die reine Hybrid-Vorhersage, während die Hit Rate für den Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ keine Änderung durch die Feiertagskorrektur erfährt und die FAR für diesen Schwellenwert geringfügig ansteigt. Insgesamt ergeben sich Verbesserungen in den statistischen Kennwerten durch die Feiertagskorrektur für $n = 12$ und $n = 26$ Wochen, so dass analog zur Wochentagskorrektur

ein Mittelungszeitraum über mindestens $n = 12$, besser $n = 26$ Wochen zur Bestimmung der Feiertagskorrekturfaktoren empfohlen wird.

Tabelle 18: NO₂-Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die reine Hybrid-Vorhersage (CAMS HV) sowie mit Feiertagskorrektur mit einem Mittelungszeitraum über 1, 2, 12 und 26 Wochen (HD1, ..., HD26), jeweils 1. Prognosetag, Median über alle Verkehrsstationen, 2019

Metrik	CAMS HV HV	CAMS HV HD1	CAMS HV HD2	CAMS HV HD12	CAMS HV HD26
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.136	0.126	0.125	0.121	0.132
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	34.252	34.252	34.252	34.252	34.252
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	34.300	34.250	34.249	34.210	34.203
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	133.075	133.075	133.075	133.075	133.075
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	132.859	133.904	132.859	132.859	132.859
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.934	17.934	17.934	17.934	17.934
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.250	18.243	18.246	18.247	18.246
Korrelation [-]	0.553	0.556	0.555	0.556	0.556
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.104	17.079	17.079	17.075	17.075
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.008	-0.043	-0.040	-0.069	-0.068
MFB [%]	-0.378	-0.637	-0.604	-0.653	-0.670
FGE [%]	39.984	40.028	40.058	39.989	39.985
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	2786	2786	2786	2786	2786
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	59.862	59.862	59.848	59.900	59.890
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	20.567	20.498	20.577	20.481	20.463
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	23	23	23	23	23
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	17.980	17.980	17.980	17.980	17.980
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.264	0.270	0.271	0.271	0.270

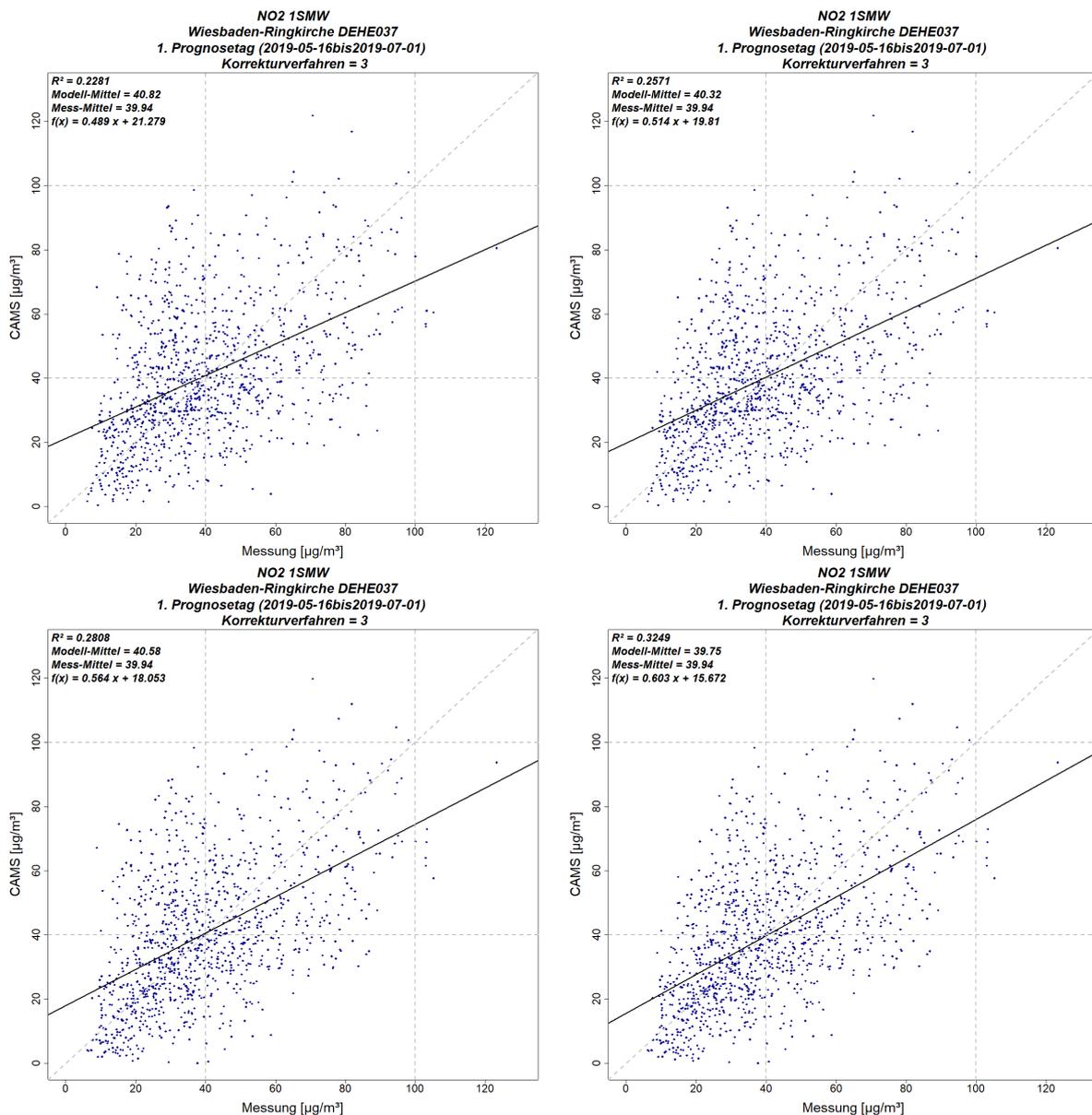
¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

Für die weiteren Arbeiten im Projekt wurde analog zur Wochentagskorrektur in Kapitel 8 ein Mittelungszeitraum von $n = 26$ Wochen zur Bestimmung der Feiertagskorrekturfaktoren gewählt. Der Einfluss der Feiertagskorrektur wird im Folgenden am Beispiel einer der Stationen diskutiert, die stärker von der Feiertagskorrektur profitieren. Abbildung 61 zeigt die Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte für die Station DEHE037 Wiesbaden-Ringkirche für den Zeitraum Mitte Mai bis Ende Juni 2019. In diesem Zeitraum traten in Hessen drei Feiertage unter der Woche auf, Christi Himmelfahrt am Donnerstag, den 30.05.2019, Pfingstmontag am 10.06.2019 und Fronleichnam am Donnerstag, den 20.06.2019. Verglichen werden in Abbildung 61 die reine Hybrid-Vorhersage, die Hybrid-Vorhersage mit Feiertagskorrektur, die Hybrid-

Vorhersage mit Wochentagskorrektur sowie die Hybrid-Vorhersage mit kombinierter Wochentags- und Feiertagskorrektur. Demnach führt die Feiertagskorrektur an der Station DEHE037 in dem betrachteten Zeitraum von rund 6 Wochen gegenüber der Hybrid-Vorhersage zu einer Verbesserung des Korrelationskoeffizienten von 0.48 auf 0.51. Gleichzeitig nimmt die Differenz zwischen den Mittelwerten der modellierten und der gemessenen Werte gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage ab, und die Steigung der Regressionsgeraden nimmt zu. Durch die Wochentagskorrektur steigt der Korrelationskoeffizient von 0.48 auf 0.53 an. Die Differenz der Mittelwerte nimmt nicht ganz so stark ab wie bei der Feiertagskorrektur, dafür steigt die Regressionsgerade etwas stärker an. Durch die Kombination von Wochentags- und Feiertagskorrektur steigt der Korrelationskoeffizient auf 0.57, die Differenz der Mittelwerte ist hier am geringsten unter den vier betrachteten Verfahren und die Steigung der Regressionsgeraden am größten.

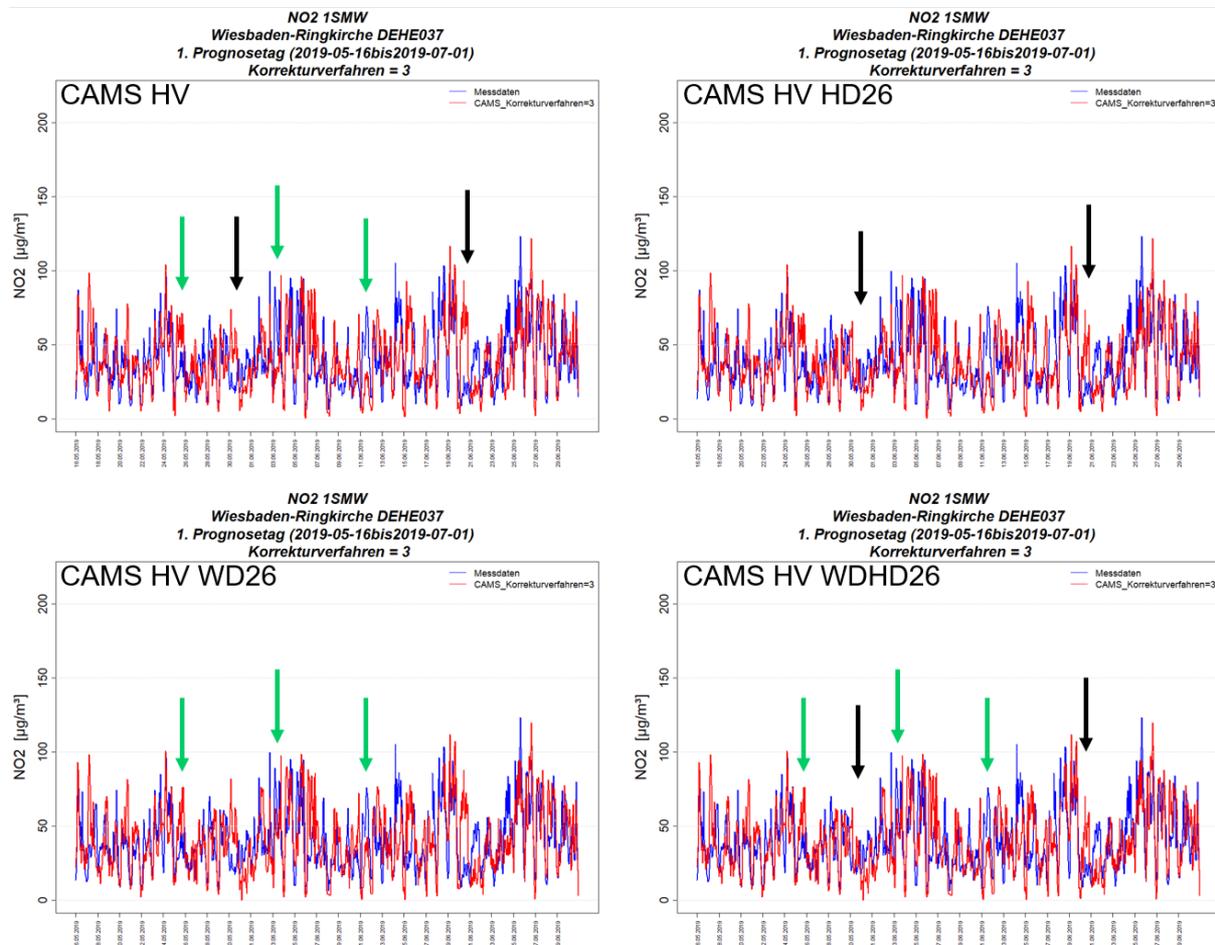
Abbildung 61: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEHE037 Wiesbaden-Ringkirche, 1. Prognosetag, Mitte Mai - Juni 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Feiertagskorrektur. Unten links: Wochentagskorrektur. Unten rechts: Wochen- und Feiertagskorrektur kombiniert.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 62 sind die entsprechenden Zeitreihen für die vier betrachteten Verfahren zusammengestellt. Die schwarzen Pfeile zeigen an, an welchen Tagen der Einfluss der Feiertagskorrektur auf die NO₂-Prognose gut zu erkennen ist. Insbesondere am 30.05, aber auch am 20.06. ist die Minderung der prognostizierten Werte gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage deutlich sichtbar, was in beiden Fällen eine bessere Erfassung der Messwerte bedeutet. Die grünen Pfeile zeigen Tage an, an denen der Einfluss der Wochentagskorrektur deutlich wird. Gut zu erkennen ist die Dämpfung des prognostizierten Konzentrationsverlaufs am Samstag, dem 25.05, sowie die Erhöhung am Montag, dem 03.06. und am Dienstag nach Pfingsten, dem 11.06. Auch hier werden durch die Korrektur der Hybrid-Vorhersage die Messwerte besser erfasst. In der Kombination wirken die Einflüsse beider Korrekturen zusammen.

Abbildung 62: Zeitreihen der NO₂-Stundenmittelwerte, DEHE037 Wiesbaden-Ringkirche, 1. Prognosetag, Mitte Mai - Juni 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Feiertagskorrektur. Unten links: Wochentagskorrektur. Unten rechts: Wochen- und Feiertagskorrektur kombiniert. Wochenenden im Mai: 18./19., 25./26. Wochenenden im Juni: 01./02., 08./09., 15./16., 22./23., 29./30. Feiertage: Donnerstag, 30.05.; Montag, 10.06.; Donnerstag, 20.06.

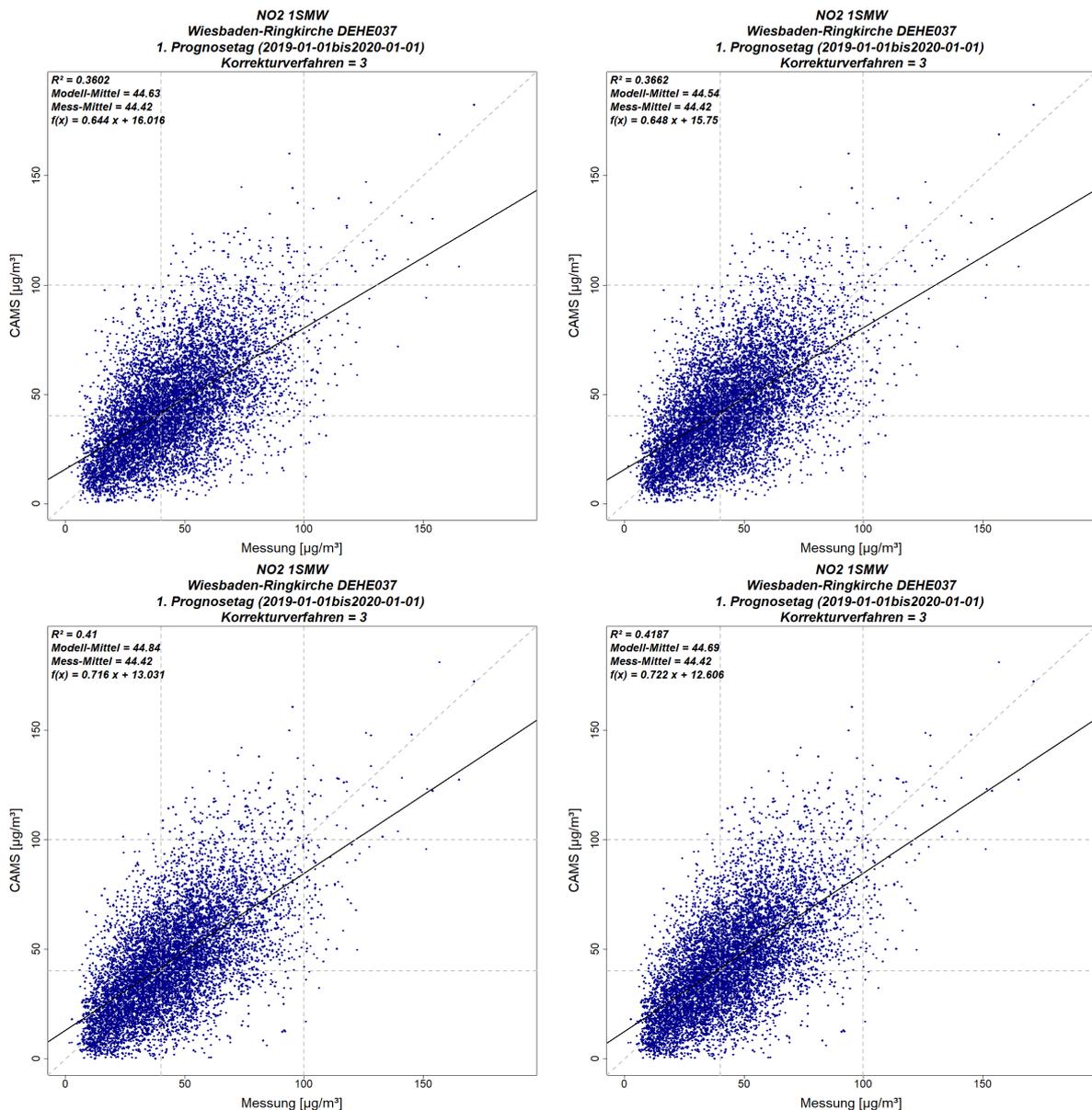


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Abbildung 63 zeigt zum Vergleich die Scatterplots für die vier betrachteten Verfahren an der Station DEHE037 für das ganze Jahr 2019. Da die Korrektur von Feiertagen unter der Woche bezogen auf das ganze Jahre nur relativ wenige Tage betrifft, reduziert sich der Einfluss der Feiertagskorrektur auf die statistischen Kennwerte ähnlich wie in Tabelle 18 auf den Nach-

kommabereich. Während sich durch die Wochentagskorrektur der Korrelationskoeffizient gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage von 0.600 auf 0.640 erhöht, führt die Feiertagskorrektur nur zu einer Erhöhung des Korrelationskoeffizienten von 0.600 auf 0.605 gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage und in Kombination mit der Wochentagskorrektur zu einer Erhöhung von 0.640 auf 0.647 gegenüber der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur. Desgleichen wird die Steigung der Regressionsgerade vor allem durch die Wochentagskorrektur und nur geringfügig durch die Feiertagskorrektur verbessert.

Abbildung 63: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEHE037 Wiesbaden-Ringkirche, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Feiertagskorrektur. Unten links: Wochentagskorrektur. Unten rechts: Wochen- und Feiertagskorrektur kombiniert.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Tabelle 19 sind die Mediane der statistischen Kennwerte für alle vier hier betrachteten Verfahren im Vergleich aufgeführt, jeweils für den 1. Prognosetag und bezogen auf das ganze Jahr 2019. Wie bereits im Zusammenhang mit Tabelle 18 und Abbildung 63 diskutiert, führt die Feiertagskorrektur bezogen auf das ganze Jahr auch im Median über alle verkehrsnahen Messstationen zu nur geringfügigen Änderungen gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage bzw. der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur. Der modellierte Mittelwert sinkt im Median minimal, was dadurch bedingt ist, dass das Konzentrationsniveau an Feiertagen unter der Woche durch die Feiertagskorrektur im Regelfall abgesenkt wird. Modellierte Maximalwerte und Standardabweichung bleiben jeweils gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage bzw. der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur konstant. Gleiches gilt annähernd auch für den FGE. Korrelationskoeffizient und RMSE erfahren eine minimale Verbesserung. Der MFB steigt minimal auf niedrigem Niveau. Die Hit Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ steigt minimal gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage und verringert sich geringfügig gegenüber der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur. Die FAR mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ hingegen sinkt sowohl gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage als auch gegenüber der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur. Hit Rate und FAR mit Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bleiben jeweils gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage bzw. der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur konstant. Insgesamt werden die wesentlichen Änderungen in den statistischen Kennwerten bei dem Vergleich in Tabelle 19 durch die Wochentagskorrektur ausgelöst, die mehr Tage im Jahr betrifft als die Feiertagskorrektur.

Tabelle 19: NO₂-Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die reine Hybrid-Vorhersage (CAMS HV), die Hybrid-Vorhersage mit Feiertags- bzw. Wochentagskorrektur (CAMS HV HD26 bzw. WD26) und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (CAMS HV WDHD26), jeweils 1. Prognosetag, Median über alle verkehrsnahen Stationen, 2019

Metrik	CAMS HV	CAMS HV HD26	CAMS HV WD26	CAMS HV WDHD26
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.00	2.00	2.00	2.00
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.14	0.13	0.03	0.03
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	34.25	34.25	34.25	34.25
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	34.30	34.20	34.58	34.44
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	133.08	133.08	133.08	133.08
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	132.86	132.86	139.00	139.00
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.93	17.93	17.93	17.93
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.25	18.25	18.96	18.96
Korrelation [-]	0.55	0.56	0.59	0.60
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.10	17.08	16.43	16.39
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.01	-0.07	0.26	0.16
MFB [%]	-0.38	-0.67	-1.92	-2.30
FGE [%]	39.98	39.99	40.09	40.08
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	2786	2786	2786	2786
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	59.86	59.89	62.73	62.64
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	20.57	20.46	20.40	20.28
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	23	23	23	23
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	17.98	17.98	20.29	20.29
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.26	0.27	0.36	0.36

¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

Tabelle 20 zeigt die Mediane der statistischen Kennwerte für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur und mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für das Bezugsjahr 2019, jeweils für alle drei Prognosetage. Demnach nimmt die Vorhersagegüte beider Verfahren mit ansteigendem Prognosetag in gleicher Weise ab. Beispielsweise sinkt der Korrelationskoeffizient im Median von 0.59 auf 0.48 bzw. von 0.6 auf 0.49 und die Hit Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ von 62.7 % auf 57.5 % bzw. von 62.6 % auf 57.6 %. Allerdings ist die Abnahme der Vorhersagegüte mit dem Prognosetag geringer als für die reine Hybrid-Vorhersage (Tabelle 13), was zusammen mit der grundsätzlichen Verbesserung der Hybrid-Vorhersage durch die Wochentags- und die Feiertagskorrektur dazu führt, dass die Mediane der statistischen Kennwerte

dieser beiden Verfahren für den dritten Prognosetag in der Regel besser sind als für die reine Hybrid-Vorhersage am zweiten Prognosetag.

Tabelle 20: NO₂-Stundenmittelwerte: Statistische Kennwerte für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur (CAMS HV WD26) und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (CAMS HV WDHD26), jeweils 1. bis 3. Prognosetag (PT1 bis PT3), Median über alle verkehrsnahen Stationen, 2019

Metrik	CAMS HV WD26 PT1	CAMS HV WD26 PT2	CAMS HV WD26 PT3	CAMS HV WDHD26 PT1	CAMS HV WDHD26 PT2	CAMS HV WDHD26 PT3
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	34.25	34.24	34.29	34.25	34.24	34.29
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	34.58	34.57	34.71	34.44	34.44	34.55
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	133.08	133.08	132.00	133.08	133.08	132.00
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	139.00	139.89	142.23	139.00	139.89	142.23
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.93	17.95	17.93	17.93	17.95	17.93
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.96	19.05	19.03	18.96	19.04	19.04
Korrelation [-]	0.59	0.53	0.48	0.60	0.53	0.49
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	16.43	17.80	18.45	16.39	17.79	18.40
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.26	0.26	0.33	0.16	0.16	0.22
MFB [%]	-1.92	-2.35	-2.26	-2.30	-2.67	-2.64
FGE [%]	40.09	44.07	45.28	40.08	43.97	45.29
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	2786	2777	2765	2786	2777	2765
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	62.73	59.03	57.53	62.64	59.03	57.55
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	20.40	22.61	24.10	20.28	22.41	23.96
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	23	23	23	23	23	23
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	20.29	12.50	10.26	20.29	12.50	10.26
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.36	0.34	0.32	0.36	0.34	0.32

¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

In Tabelle 21 bis Tabelle 23 sind die Modellierungsqualitäts-Indikatoren des FAIRMODE-DELTA-Tools für die reine Hybrid-Vorhersage, die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur sowie die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für alle drei Prognosetage zusammengefasst.

Für den MQI_{HD} (Tabelle 21) ergeben sich ausschließlich Werte kleiner 1, d. h. das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO des FAIRMODE-DELTA-Tools ist in allen Fällen erfüllt. Der MQI_{HD} wird durch die Wochentagskorrektur gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage reduziert, durch Kombination mit der Feiertagskorrektur wird eine weitere geringfügige

Verringerung erzielt. Der MQI_HD steigt für alle drei Verfahren über die drei Prognosestage an, allerdings fällt der Anstieg für die beiden korrigierten Verfahren geringer aus als für die reine Hybrid-Vorhersage. Zusammen mit der grundsätzlichen Verbesserung der Hybrid-Vorhersage durch die Wochentags- und die Feiertagskorrektur führt dies wie schon bei den statistischen Kennwerten in Tabelle 20 dazu, dass der MQI_HD für die beiden korrigierten Verfahren am 3. Prognosestag niedriger und damit besser ist als für die reine Hybrid-Vorhersage am 2. Prognosestag.

Der MQI_YR (Tabelle 22) steigt ebenfalls über die drei Prognosestage an. Er ist im Gegensatz zum MQI_HD für die beiden korrigierten Verfahren etwas höher als für die reine Hybrid-Vorhersage, wobei die Kombination mit der Feiertagskorrektur die Werte gegenüber der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur wieder etwas reduziert. Insgesamt sind die Werte für den MQI_YR aber mit einem Maximalwert von 0.053, der sich für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur am 3. Prognosestag ergibt, sehr niedrig.

Für den MQI_Forecast (Tabelle 23) ergeben sich wie für den MQI_HD ausschließlich Werte kleiner 1, d. h., auch das Modellierungsqualitäts-Ziel MQO_Forecast ist in allen Fällen erfüllt. Wie der MQI_HD erfährt der MQI_Forecast durch die Wochentagskorrektur eine Reduktion gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage, durch Kombination mit der Feiertagskorrektur wird eine weitere geringfügige Verringerung erzielt. Der MQI_Forecast nimmt für alle drei Prognosestage mit steigendem Prognosestag ab, wobei diese Abnahme und damit die Verbesserung gegenüber dem persistenten Modell für die beiden korrigierten Verfahren stärker ist als für die reine Hybrid-Vorhersage

Tabelle 21: NO₂-Stundenmittelwerte: MQI_HD für die reine Hybrid-Vorhersage (CAMS HV), die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur (CAMS HV WD26) und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (CAMS HV WDHD26), 1. bis 3. Prognosestag

Prognosestag	CAMS HV	CAMS HV WD26	CAMS HV WDHD26
1	0.728	0.706	0.705
2	0.833	0.781	0.779
3	0.861	0.824	0.820

Tabelle 22: NO₂-Stundenmittelwerte: MQI_YR für die reine Hybrid-Vorhersage (CAMS HV), die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur (CAMS HV WD26) und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (CAMS HV WDHD26), 1. bis 3. Prognosestag

Prognosestag	CAMS HV	CAMS HV WD26	CAMS HV WDHD26
1	0.013	0.036	0.028
2	0.022	0.046	0.038
3	0.023	0.053	0.046

Tabelle 23: NO₂-Stundenmittelwerte: MQI_Forecast für die reine Hybrid-Vorhersage (CAMS HV), die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur (CAMS HV WD26) und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (CAMS HV WDHD26), 1. bis 3. Prognosetag

Prognosetag	CAMS HV	CAMS HV WD26	CAMS HV WDHD26
1	0.994	0.971	0.965
2	0.978	0.933	0.932
3	0.973	0.930	0.928

9.2 Fazit

Die Auswertungen in Abschnitt 9.1 haben gezeigt, dass sich durch die Feiertagskorrektur insbesondere für die Mittelungszeiträume $n = 12$ und $n = 26$ Wochen Verbesserungen in den statistischen Kennwerten und damit in der Vorhersagegüte ergeben, so dass analog zur Wochentagskorrektur ein Mittelungszeitraum über mindestens $n = 12$, besser $n = 26$ Wochen zur Bestimmung der Feiertagskorrekturfaktoren empfohlen wird.

Die statistischen Verbesserungen sind dabei aufgrund der geringen Anzahl Feiertage unter der Woche, auf die die Feiertagskorrektur angewendet wird, bezogen auf ein ganzes Jahr von untergeordneter Bedeutung. Wie am Beispiel der Station DEHE037 gezeigt wurde, ist der Einfluss der Feiertagskorrektur auf den einzelnen Feiertag aber durchaus relevant und für kürzere Zeiträume mit mehreren Feiertagen unter der Woche auch statistisch deutlich zu erkennen.

Die statistischen Auswertungen für die drei Prognosetage haben zudem gezeigt, dass sowohl bei der Wochentagskorrektur als auch bei der Kombination von Wochentags- und Feiertagskorrektur die Abnahme der Vorhersagegüte für die weiter entfernten Prognosetage geringer ist als bei der reinen Hybrid-Vorhersage.

Die Verwendung der Feiertagskorrektur im Zusammenhang mit der Hybrid-Vorhersage mit $n_{\text{Vorlauf}} = 1$ Tag und in Kombination mit der Wochentagskorrektur wird daher für verkehrsnahen NO₂-Messstationen grundsätzlich empfohlen. Rein technisch sind Wochentags- und Feiertagskorrektur in der Testumgebung so umgesetzt, dass sie sowohl jeweils allein als auch in Kombination miteinander zur Hybrid-Vorhersage zugeschaltet werden können.

Die Anwendung der Feiertagskorrektur für PM₁₀-Messstationen wird hingegen nicht empfohlen, weil sich, wie in Abschnitt 4.3 diskutiert, bei den Auswertungen der mittleren Konzentrationsniveaus der Tagesmittelwerte der PM₁₀-Messdaten keine einheitlichen Tendenzen hinsichtlich der Verhältnisse der Konzentrationsniveaus der einzelnen Tagestypen zueinander ergeben haben.

10 Evaluierung der Linearen Modelle

10.1 Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee

10.1.1 Eingangsdaten

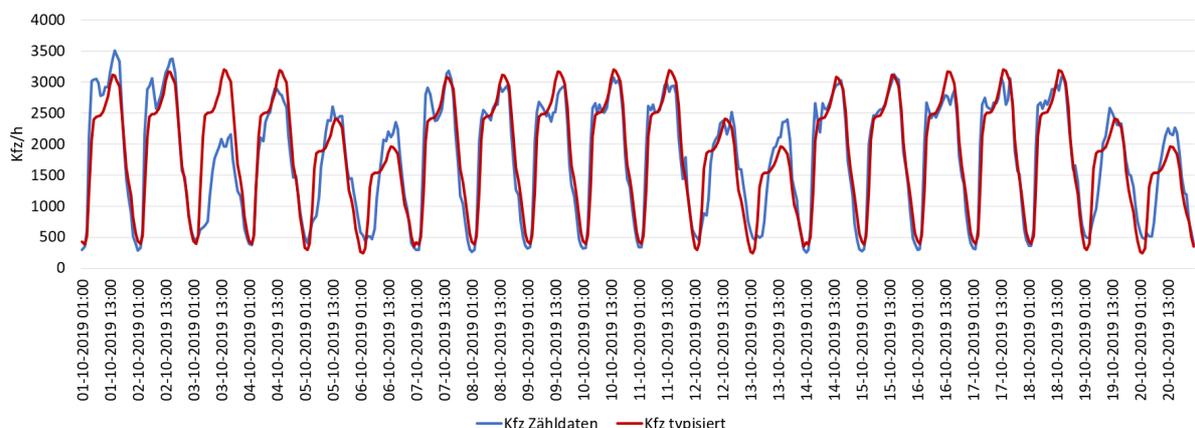
Am Beispiel der Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee wurden verschiedene Lineare Modelle zur Prognose der NO₂-Konzentration an verkehrsnahen Messstationen auf Basis stündlicher Zeitreihen entwickelt und evaluiert sowie mit den Ergebnissen aus Abschnitt 7.4 und Abschnitt 9.1 verglichen (siehe Abschnitt 4.4.1). Grundlage der Linearen Modelle war jeweils eine Multivariate Regressionsanalyse. Dazu wurden folgende Eingangsgrößen herangezogen:

- ▶ die stündliche Ganglinie des Kfz-Verkehrs 2019 für die Frankfurter Allee (S-VELD, 2022),
- ▶ die stündliche Zeitreihen der Windgeschwindigkeit und -richtung 2019 der DWD-Messstation Berlin-Tempelhof,
- ▶ der Wochentag und
- ▶ die Stunde des Tages.

Die Originaldaten des Kfz-Verkehrs sind richtungsbezogen und wurden hier aufaddiert, um Querschnittswerte zu erhalten. Abbildung 64 zeigt beispielhaft einen Ausschnitt der querschnittsbezogenen Ganglinie von drei Wochen im Oktober 2019 (blaue Linie).

Da nicht für jede Verkehrsstation aktuelle Kfz-Zählraten zur Verfügung stehen und insbesondere bei einer potentiellen operationellen Anwendung eines der entwickelten Linearen Modelle ggf. auch Verkehrsprognosen zum Einsatz kommen würden, wurde im vorliegenden Projekt für die in Abschnitt 10.1.2.2 betrachteten LM-Delta-Ansätze untersucht, wie sensitiv die Modellergebnisse auf Änderungen bzw. Unsicherheiten in den Kfz-Eingangsdaten reagieren (Abschnitt 10.1.3). Dazu wurde die querschnittsbezogene Kfz-Ganglinie der Frankfurter Allee typisiert, indem daraus Monats-, Wochen- und Tagesgänge gebildet wurden und daraus wieder eine stündliche Zeitreihe erstellt wurde (Abbildung 64, rote Linie).

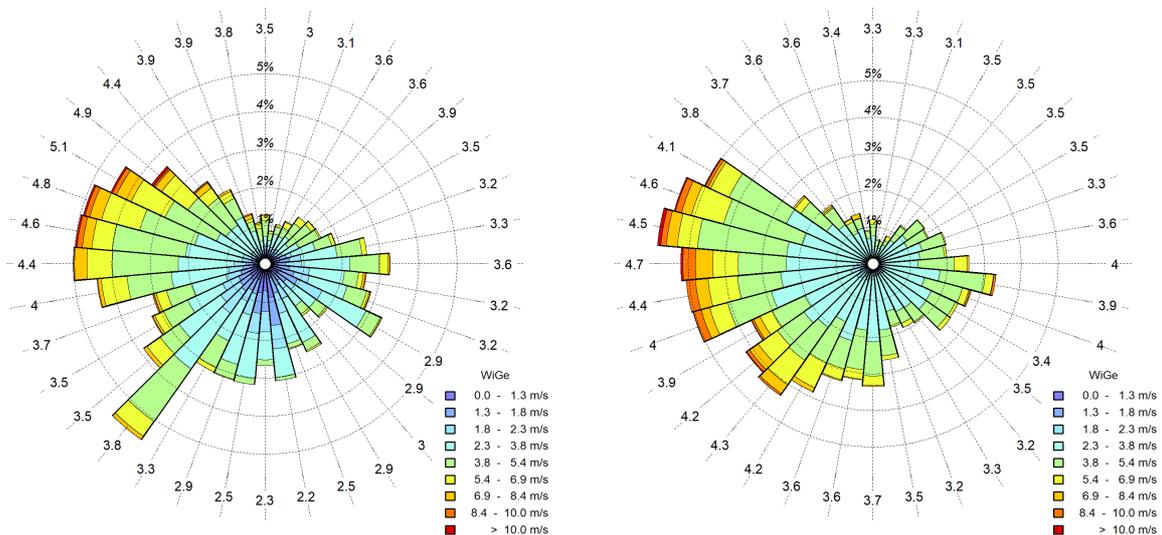
Abbildung 64: Stündliche Verkehrsganglinie für den Querschnitt der Frankfurter Allee, Berlin, beispielhaft für 3 Wochen im Oktober 2019



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Als stündliche Zeitreihen der Windgeschwindigkeit und -richtung 2019 wurden die Messdaten der DWD-Messstation Berlin-Tempelhof verwendet, die von der Open-Data-Plattform des DWD³ heruntergeladen wurden (Abbildung 65, links). Im Hinblick auf eine spätere operationelle Anwendung wurde zudem für die LM-Delta-Ansätze aus Abschnitt 10.1.2.2 untersucht, welchen Einfluss die Verwendung prognostizierter statt gemessener meteorologischer Eingangsdaten auf die Modellergebnisse hat (Abschnitt 10.1.4). Dazu wurden MOSMIX-Daten für Berlin-Tempelhof verwendet, die vom DWD für das vorliegende Projekt bereitgestellt wurden (Abbildung 65, rechts).

Abbildung 65: Windrosen Berlin-Tempelhof, 2019. Links: Messdaten. Rechts: MOSMIX-Prognose.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

10.1.2 Windgeschwindigkeit, Windrichtung und Verkehr aus Beobachtungsdaten

10.1.2.1 Prognose der NO₂-Konzentration

In Abschnitt 4.4.2 wird untersucht, wie stark der Zusammenhang zwischen den im Jahr 2019 gemessenen NO₂-Konzentrationen und den betrachteten Eingangsgrößen an der Station DEBE065 ist. Dabei wurde zunächst vom „best case“ ausgegangen, d. h. es wurden Beobachtungsdaten als Eingangsdaten verwendet, die im Rahmen einer operationellen Prognose nicht zur Verfügung stehen würden. Im vorliegenden Fall sollte aber zunächst einmal untersucht werden, ob es überhaupt einen Zusammenhang zwischen den gemessenen NO₂-Konzentrationen und den betrachteten Größen gibt und welche Größen als Eingangsdaten erforderlich bzw. sinnvoll sind. Dazu wurde mit Hilfe einer Multivariaten Regressionsanalyse das Bestimmtheitsmaß R^2 für verschiedene Kombinationen von Eingangsgrößen berechnet (Tabelle 3).

In diesem Abschnitt werden nun die Ergebnisse vier verschiedener Linearer Modelle aus Tabelle 3 zur Prognose der NO₂-Konzentration an der Station DEBE065 vorgestellt. Eingesetzt wurden die Modelle Nr. 11 (KFZ, WiGe, WiRi), Nr. 15 (KFZ, WiGe, WiRi, WoTag), Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag) und Nr. 17 (KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag), für die sich von den untersuchten Modellen die höchsten Werte für das Bestimmtheitsmaß ergeben haben.

³ https://opendata.dwd.de/climate_environment/CDC/observations_germany/climate/hourly/wind/

Tabelle 24 zeigt die statistischen Kennwerte der vier Linearen Modelle im Vergleich mit den statistischen Kennwerten der reinen Hybrid-Vorhersage und der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für die Station DEBE065.

Im Vergleich der Linearen Modelle untereinander weist das Modell, das alle zur Verfügung stehenden Eingangsdaten berücksichtigt (Nr. 17 - KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag), die besten statistischen Kennwerte auf, dann folgen die Modelle Nr. 15 (KFZ, WiGe, WiRi, WoTag) und Nr. 11 (KFZ, WiGe, WiRi), die ebenfalls Kfz-Daten berücksichtigen, sowie das Modell Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag), das keine Kfz-Daten verwendet.

Alle vier Linearen Modelle weisen für Korrelation, RMSE, FGE sowie Hit Rate und False Alarm Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bessere statistische Werte auf als die beiden aufgeführten Varianten der korrigierten CAMS-Prognosen. So beträgt beispielsweise der Korrelationskoeffizient für die reine Hybrid-Vorhersage 0.54 und für die korrigierte Hybrid-Vorhersage 0.62, während er für die Linearen Modelle zwischen 0.71 und 0.77 liegt. Auch die Hit Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ liegt für die Linearen Modelle mit Werten zwischen rund 75 % und rund 78 % mindestens 10 Prozentpunkte höher als für die korrigierte Hybrid-Vorhersage mit knapp 66 %. Auf der anderen Seite werden die Maximalwerte und die Standardabweichung, die von den beiden korrigierten CAMS-Prognosen gut wiedergegeben werden, von den Linearen Modellen deutlich unterschätzt. Die Unterschätzung hoher Konzentrationswerte geht bei den Linearen Modellen damit einher, dass die Überschreitungen des Schwellenwerts $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ nicht erfasst werden, die entsprechende Hit Rate beträgt 0 %. Allerdings liegt die Hit Rate mit Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ für die korrigierten CAMS-Prognosen mit knapp 7% nicht wesentlich höher, denn damit wird genau 1 der 15 gemessenen Überschreitungen erfasst.

Tabelle 24: Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie verschiedene Lineare Modelle zur Prognose der NO₂-Konzentration: Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee. Bezugsjahr 2019, 1. Prognosetag.

Metrik	CAMS HV	CAMS HV WDHD26	WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi	KFZ+ WiGe+ WiRi+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.89	2.89	2.89	2.89	2.89	2.89
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.57	0.04	0.08	0.08	0.10	0.22
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35.15	35.15	35.23	35.23	35.23	35.23
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35.13	35.32	35.28	35.26	35.26	35.26
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	119.95	119.95	119.95	119.95	119.95	119.95
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	126.87	114.82	66.92	67.98	69.17	74.37
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.45	18.45	18.45	18.45	18.45	18.45
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.51	19.19	12.93	13.54	13.78	14.06
Korrelation [-]	0.54	0.62	0.71	0.74	0.75	0.77
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.68	16.42	13.00	12.43	12.17	11.84
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-0.02	0.17	0.05	0.03	0.03	0.03
MFB [%]	-0.18	-2.48	5.01	4.59	4.27	4.07
FGE [%]	39.89	40.19	31.92	29.56	29.08	28.38
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	3136	3136	3126	3126	3126	3126
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	59.63	65.78	75.66	76.49	77.35	78.31
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	21.63	20.24	19.48	17.98	16.61	16.58
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	15	15	15	15	15	15
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	6.67	6.67	0.00	0.00	0.00	0.00
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.19	0.22	0.00	0.00	0.00	0.00

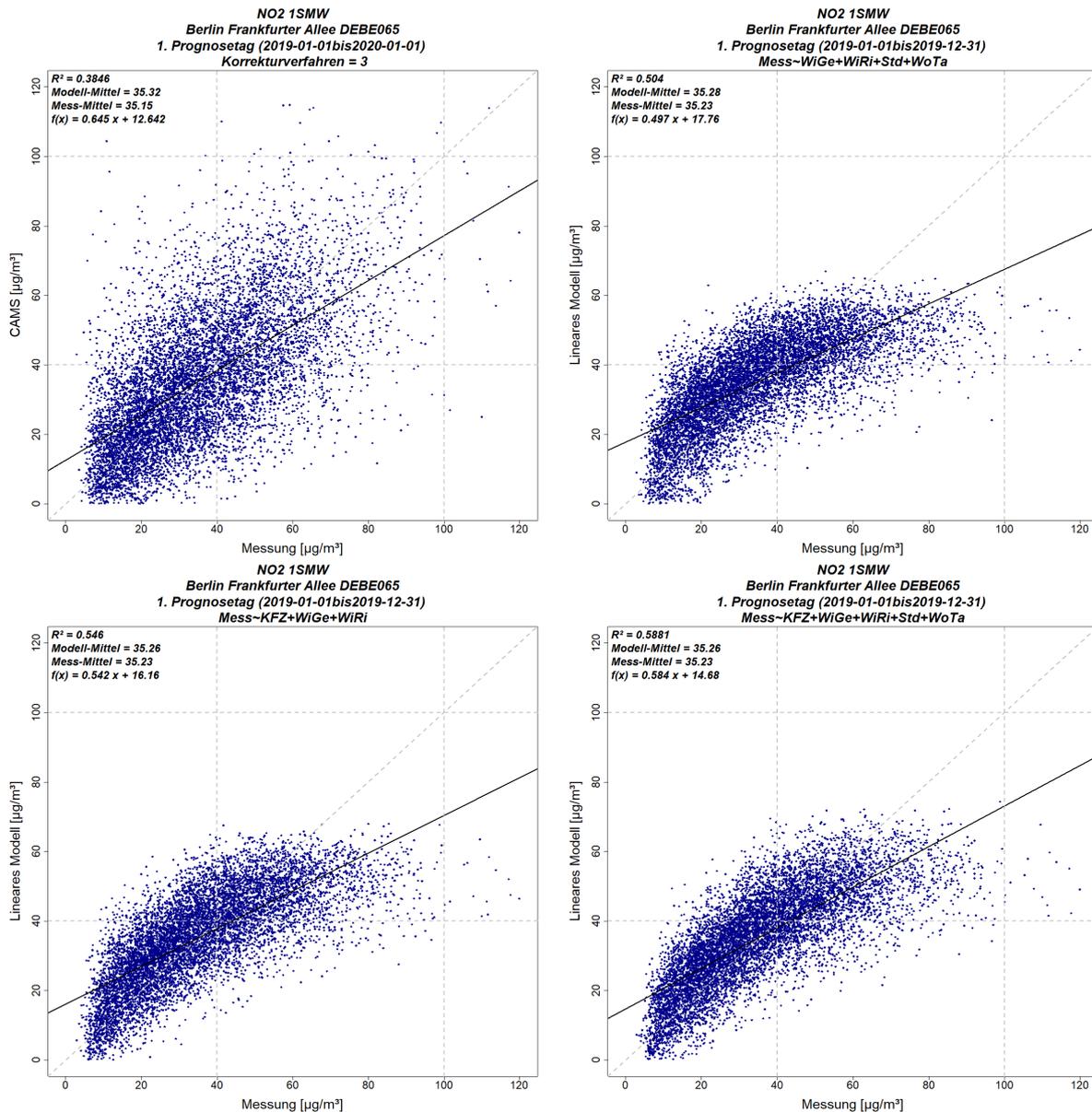
¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

In Abbildung 66 sind vier Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee für das Bezugsjahr 2019 zusammengestellt, zum einen für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur und zum anderen für die Linearen Modelle Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag), Nr. 11 (KFZ, WiGe, WiRi) und Nr. 17 (KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag). Auf der einen Seite erzeugen die Linearen Modelle eine deutlich geringere Streuung als die korrigierten CAMS-Prognosen, was sich in einem deutlich höheren Bestimmtheitsmaß und Korrelationskoeffizienten (siehe auch Tabelle 24) widerspiegelt. Für den niedrigeren Schwellenwert von $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ führt dies auch zu der deutlich höheren Hit Rate und niedrigeren FAR der Linearen Modelle gegenüber der korrigierten Hybrid-Vorhersage. Auf der anderen Seite sind die Linearen Modelle ganz offensichtlich nicht in der Lage, hohe NO₂-Konzentrationen korrekt

abzubilden. Mit Abstand am besten verhält sich in dieser Hinsicht das Lineare Modell Nr. 17 (KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag), das alle untersuchten Eingangsgrößen berücksichtigt, aber auch hier werden nur 62 % des Maximalwerts der Messungen erreicht.

Abbildung 66: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Oben rechts: Lineares Modell WiGe+WiRi+Std+WoTag. Unten links: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi. Unten rechts: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

10.1.2.2 Prognose der Differenzen zwischen den CAMS-Prognosen und der NO₂-Konzentration

Alternativ zu dem Vorgehen in Abschnitt 4.4.2 wird für den LM-Delta-Ansatz in Abschnitt 4.4.3 nicht die NO₂-Konzentration selbst am Stationsort mit Hilfe der Multivariaten Regressionsanalyse geschätzt, sondern die Differenz zwischen der CAMS-Prognose für NO₂ am Stationsort und der NO₂-Konzentration. Zur Prognose der NO₂-Konzentration am Stationsort wird dann mit dieser Differenz die CAMS-Prognose korrigiert (siehe Gleichung (10)). Im Unterschied zur

Hybrid-Vorhersage (siehe Abschnitt 4.1) wird also die Differenz zwischen Messung und Modell am Stationsort zum Prognosezeitpunkt t nicht aus der Differenz zwischen Messung und Modell von n Vorlauf Tagen zuvor berechnet, sondern durch das Lineare Modell auf Basis der gewählten Eingangsgrößen.

Auch bei diesem Ansatz wurde zunächst vom „best case“ ausgegangen, d. h. es wurden Beobachtungsdaten als Eingangsdaten verwendet, die im Rahmen einer operationellen Prognose nicht zur Verfügung stehen würden, die aber dazu dienen zu untersuchen, ob es den gesuchten Zusammenhang zwischen den Differenzen und den betrachteten Größen überhaupt gibt. Dazu wurde mit Hilfe der Multivariaten Regressionsanalyse das adjustierte Bestimmtheitsmaß R^2 für die gleichen Kombinationen von Eingangsgrößen berechnet wie in Abschnitt 4.4.2 (Tabelle 4).

In diesem Abschnitt werden nun die Prognosen der NO_2 -Konzentration an der Station DEBE065 vorgestellt, die sich für den LM-Delta-Ansatz auf Basis der gleichen vier Lineare Modelle Nr. 11, 15, 16 und 17 wie in Abschnitt 10.1.2.1 ergeben. Tabelle 25 zeigt dazu die statistischen Kennwerte, wieder im Vergleich mit den statistischen Kennwerten der reinen Hybrid-Vorhersage und der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für die Station DEBE065.

Im Vergleich der LM-Delta-Ansätze untereinander weist wie schon in Abschnitt 10.1.2.1 das Modell, das alle zur Verfügung stehenden Eingangsdaten berücksichtigt (Nr. 17 - KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag), die besten statistischen Kennwerte auf, dann folgen die Modelle Nr. 15 (KFZ, WiGe, WiRi, WoTag) und Nr. 11 (KFZ, WiGe, WiRi), die ebenfalls Kfz-Daten berücksichtigen, sowie das Modell Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag), das keine Kfz-Daten verwendet. Eine Ausnahme bildet hier der modellierte Maximalwert, der für das Modell Nr. 17 am niedrigsten und für das Modell Nr. 11 am höchsten ist. Der modellierte Maximalwert des Modells Nr. 11 erreicht dabei knapp 89 % des gemessenen Maximalwerts, liegt also deutlich höher als der höchste modellierte Maximalwert in Abschnitt 10.1.2.1.

Analog zu Abschnitt 10.1.2.1 weisen die Prognosen der vier LM-Delta-Ansätze für Korrelation, RMSE, FGE sowie Hit Rate und False Alarm Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bessere statistische Werte auf als die beiden aufgeführten Varianten der korrigierten CAMS-Prognosen. So liegt beispielweise der Korrelationskoeffizient für die LM-Delta-Ansätze zwischen 0.74 und 0.79 und damit nicht nur über den Werten der beiden Hybrid-Vorhersagen, sondern auch über den Werten der Linearen Modelle zur direkten Prognose der NO_2 -Konzentrationen ohne Beteiligung von CAMS-Daten in Abschnitt 10.1.2.1. Auch die Hit Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ liegt für die LM-Delta-Ansätze mit Werten zwischen rund 73 % und rund 77 % deutlich höher als für die korrigierte Hybrid-Vorhersage, wenn auch geringfügig niedriger als für die Linearen Modelle zur direkten Prognose der NO_2 -Konzentrationen. Dafür ist die zugehörige FAR für die LM-Delta-Ansätze deutlich niedriger als in Abschnitt 10.1.2.1. Maximalwerte und Standardabweichung werden von den vier LM-Delta-Ansätzen immer noch unterschätzt, aber weniger als von den Linearen Modellen in Abschnitt 10.1.2.1. Allerdings werden die Überschreitungen des Schwellenwerts $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ hier ebenso wenig erfasst wie von den Linearen Modellen zur direkten Prognose der NO_2 -Konzentrationen.

Insgesamt ergeben sich damit für die LM-Delta-Ansätze unter Berücksichtigung der CAMS-Daten gemäß Abschnitt 4.4.3 nicht nur bessere statistische Kennwerte im Vergleich mit der reinen und der korrigierten Hybrid-Vorhersage, sondern auch im Vergleich mit den Linearen Modellen aus Abschnitt 4.4.2 ohne Beteiligung von CAMS-Daten. Ausnahmen davon bilden im ersten Fall die Maximalwerte und die Standardabweichung, die von den beiden Varianten der Hybrid-Vorhersage besser erfasst werden, und im zweiten Fall die Hit Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$, die für die LM-Delta-Ansätze geringfügig niedriger ausfällt als für die Linearen Modellen aus Abschnitt 4.4.2.

Tabelle 25: Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO₂-Konzentration: Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee. Bezugsjahr 2019, 1. Prognosetag.

Metrik	CAMS HV	CAMS HV WDHD26	WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi	KFZ+ WiGe+ WiRi+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.89	2.89	2.89	2.89	2.89	2.89
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.57	0.04	0.09	0.12	0.04	0.11
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35.15	35.15	35.23	35.23	35.23	35.23
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35.13	35.32	35.27	35.25	35.24	35.25
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	119.95	119.95	119.95	119.95	119.95	119.95
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	126.87	114.82	100.43	106.33	104.63	99.42
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.45	18.45	18.45	18.45	18.45	18.45
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.51	19.19	14.93	15.63	15.84	15.92
Korrelation [-]	0.54	0.62	0.74	0.77	0.78	0.79
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.68	16.42	12.40	11.74	11.53	11.34
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-0.02	0.17	0.04	0.02	0.01	0.02
MFB [%]	-0.18	-2.48	3.33	2.62	2.15	2.14
FGE [%]	39.89	40.19	30.05	27.09	26.71	26.33
MeasExc (40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	3136	3136	3126	3126	3126	3126
Hit Rate (40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	59.63	65.78	73.16	75.85	76.65	77.29
FAR (40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	21.63	20.24	15.39	14.46	14.37	14.66
MeasExc (100 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	15	15	15	15	15	15
Hit Rate (100 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	6.67	6.67	0.00	0.00	0.00	0.00
FAR (100 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.19	0.22	0.01	0.03	0.05	0.00

¹: Schwellenwert 40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

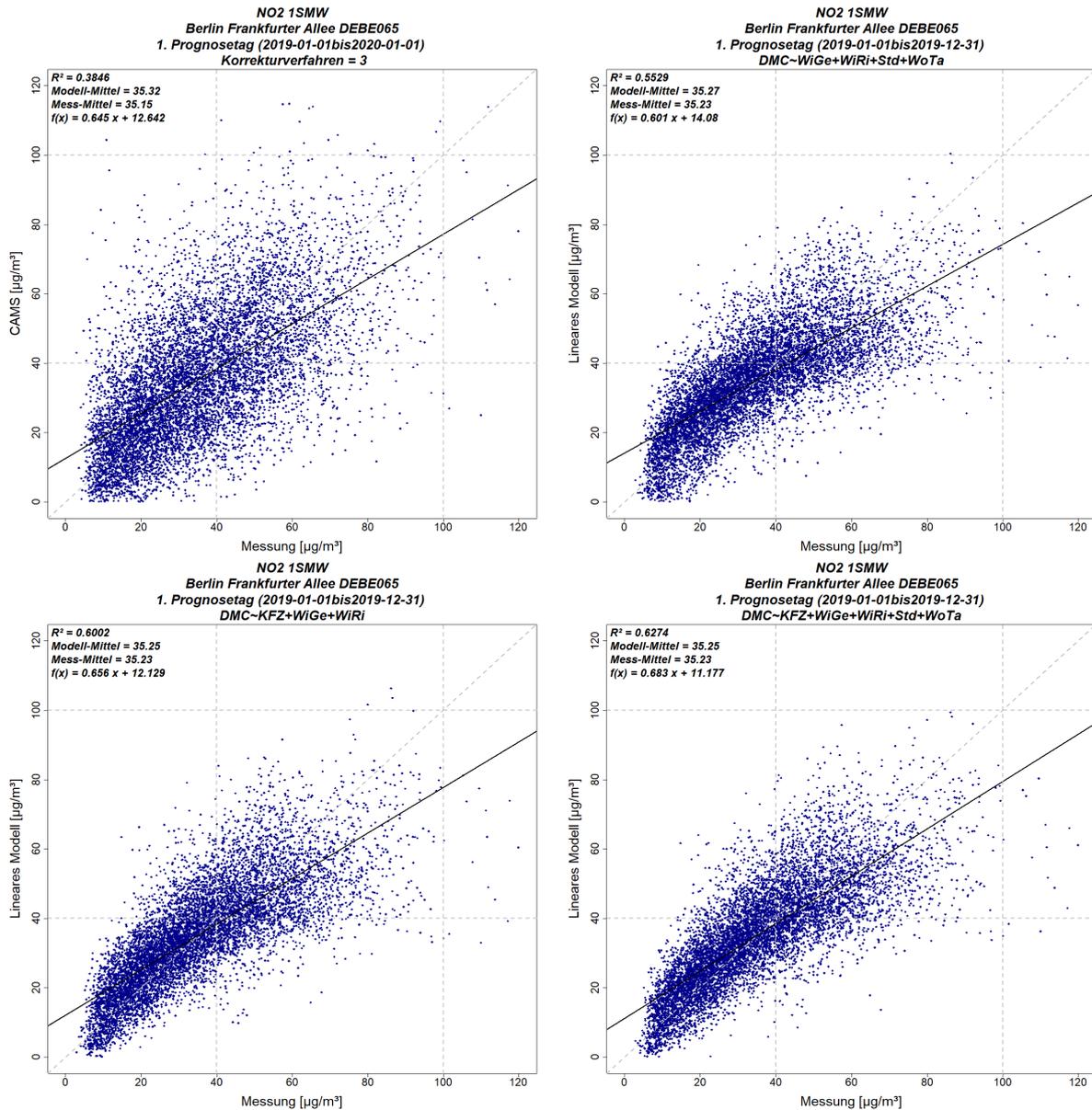
²: Schwellenwert 100 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

Abbildung 67 zeigt analog zu Abbildung 66 in Abschnitt 10.1.2.1 die vier Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee für das Bezugsjahr 2019, zum einen für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur und zum anderen für die LM-Delta-Ansätze auf Basis der Linearen Modelle Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag), Nr. 11 (KFZ, WiGe, WiRi) und Nr. 17 (KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag).

Im Vergleich mit den Linearen Modellen in Abbildung 66 wird zum einen die Streuung der Modell-Messwert-Paare noch weiter reduziert, was die Werte für das Bestimmtheitsmaß und den Korrelationskoeffizienten (siehe auch Tabelle 25) weiter erhöht. So werden im besten Fall, dem LM-Delta-Ansatz auf Basis von Modell Nr. 17, knapp 63 % der Variation in der NO₂-Konzentration an der Station DEBE065 durch die Variation in den Ergebnissen des verwendeten LM-

Delta-Ansatzes erklärt. Zum anderen werden durch die LM-Delta-Ansätze höhere NO₂-Konzentrationen etwas besser wiedergegeben als durch die Linearen Modellen in Abbildung 66, wenn auch nicht in dem Maße, dass Überschreitungen des Schwellenwertes 100 µg/m³ besser erfasst werden würden.

Abbildung 67: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagkorrektur. Oben rechts: Lineares Modell WiGe+WiRi+Std+WoTag. Unten links: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi. Unten rechts: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag.

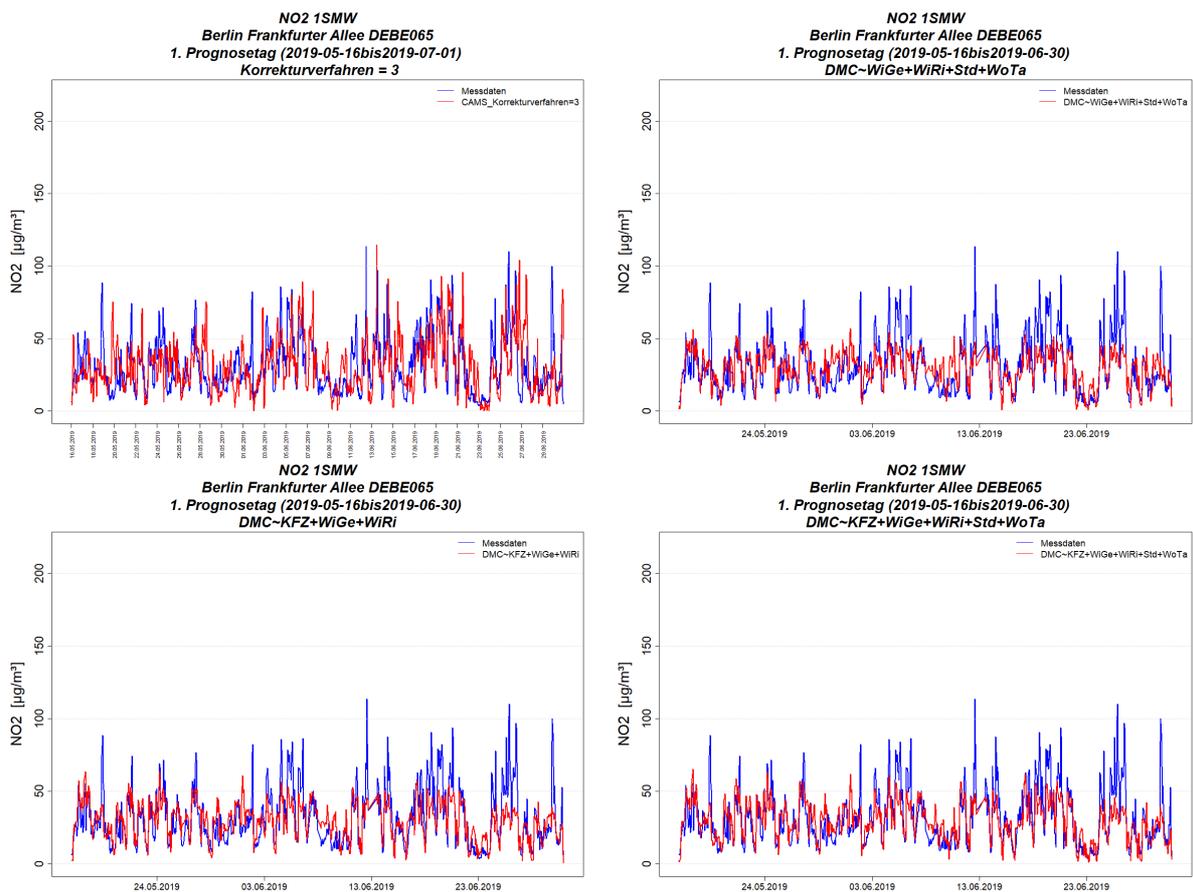


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 68 sind die entsprechenden Zeitreihen der NO₂-Stundenmittelwerte für die Station DEBE065 beispielhaft für den Zeitraum Mitte Mai bis Ende Juni 2019 dargestellt. Der Vergleich zeigt, dass der grundsätzliche zeitliche Verlauf der NO₂-Konzentrationen von den LM-Delta-Ansätzen besser beschrieben wird als von der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Die Zeitreihen der drei LM-Delta-Ansätze hingegen unterscheiden sich nur in

Details, z. B. am 03.06.2019 oder um den 23.06.2019 herum, was zeigt, dass der Ansatz, dessen Lineares Modell alle hier untersuchten Eingangsgrößen berücksichtigt, zwar die besten Ergebnisse liefert, dass aber auch mit reduzierteren Modellen, insbesondere ohne Berücksichtigung von Kfz-Daten, eine gute Erfassung des zeitlichen Verlaufs der NO₂-Konzentrationen erfolgt. Gleichzeitig wird aber auch deutlich, dass die Prognosen der LM-Delta-Ansätze die Spitzen des Konzentrationsverlaufs nicht erreichen, dass also durch die Linearen Modelle eine zu starke Dämpfung der Variabilität der Konzentrationen stattfindet, was sich auch in der zu niedrigen Standardabweichung der LM-Delta-Ansätze in Tabelle 25 widerspiegelt. Von der Hybrid-Vorhersage hingegen werden die Konzentrationsspitzen dargestellt, allerdings aufgrund des bereits diskutierten verfahrensimmanenten zeitlichen Verzugs häufig auch zum falschen Zeitpunkt.

Abbildung 68: Zeitreihen der NO₂-Stundenmittelwerte, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognosezeitraum, Mitte Mai bis Ende Juni 2019. Oben links: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagkorrektur. Oben rechts: Lineares Modell WiGe+WiRi+Std+WoTag. Unten links: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi. Unten rechts: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

10.1.2.3 Kombination verschiedener Linearer Modelle

Um speziell die hohen NO₂-Konzentrationen besser erfassen zu können, wurde testweise wie in Abschnitt 4.4.4 beschrieben das im jeweiligen LM-Delta-Ansatz verwendete Lineare Modell sowohl für alle Stunden des Tages bestimmt als auch spezifisch nur für diejenigen Tagesstunden, in denen 5 % oder mehr der Fälle auftreten, in denen die Differenz zwischen CAMS-Prognose am Stationsort und NO₂-Konzentration > 50 µg/m³ beträgt. Für diese Tagesstunden wurden dann

die berechneten Differenzen aus dem zweiten Linearen Modell für den LM-Delta-Ansatz übernommen, während für die anderen Tagesstunden die berechneten Differenzen aus dem ersten Linearen Modell verwendet wurden.

In diesem Abschnitt werden die Prognosen der NO₂-Konzentration an der Station DEBE065 vorgestellt, die sich für den LM-Delta-Ansatz auf Basis der gleichen vier Lineare Modelle Nr. 11, 15, 16 und 17 wie in Abschnitt 10.1.2.2 ergeben, allerdings hier in der eingangs beschriebenen kombinierten Form. Tabelle 26 zeigt dazu die statistischen Kennwerte, auch hier im Vergleich mit den statistischen Kennwerten der reinen Hybrid-Vorhersage und der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für die Station DEBE065.

Im Vergleich der LM-Delta-Ansätze mit kombiniertem Linearen Modell untereinander gilt das in Abschnitt 10.1.2.1 und Abschnitt 10.1.2.2 beschriebene Ranking Nr. 17 – Nr. 15 – Nr. 11 – Nr. 16 nicht mehr durchgängig für alle betrachteten statistischen Kennwerte, sondern nur noch im Mittel über alle Kennwerte sowie im Einzelnen für Korrelationskoeffizient, RMSE und FGE. Bei der modellierten Standardabweichung und der Hit Rate für den Schwellenwert 40 µg/m³ weist das Modell Nr. 15 (KFZ, WiGe, WiRi, WoTag) die besten Werte auf und bei den modellierten Maximalwerten wie in Abschnitt 10.1.2.2 das Modell Nr. 11 (KFZ, WiGe, WiRi).

Analog zu Abschnitt 10.1.2.1 und Abschnitt 10.1.2.2 weisen die Prognosen der vier LM-Delta-Ansätze mit kombiniertem Linearen Modell für Korrelation, RMSE, FGE sowie Hit Rate und False Alarm Rate mit Schwellenwert 40 µg/m³ bessere statistische Werte auf als die beiden aufgeführten Varianten der korrigierten CAMS-Prognosen, während Maximalwert und Standardabweichung von den korrigierten CAMS-Prognosen besser erfasst werden. Im Vergleich mit den LM-Delta-Ansätzen mit einfachem Linearen Modell in Abschnitt 10.1.2.2 ergeben sich durch die Verwendung eines kombinierten Linearen Modells für die meisten statistischen Kennwerte leichte Verbesserungen, die am deutlichsten für das Modell Nr. 16 ausfallen, das keine Kfz-Daten berücksichtigt. So erhöht sich beispielsweise der Korrelationskoeffizient für das Modell Nr. 16 von 0.74 auf 0.76 und die Hit Rate mit Schwellenwert 40 µg/m³ von rund 73 % auf knapp 77 %. Allerdings entsprechen die modellierten Maximalwerte exakt denjenigen, die auch durch die LM-Delta-Ansätze mit einfachem Linearen Modell erzielt wurden (vgl. Tabelle 25), und auch die Hit Rate mit Schwellenwert 100 µg/m³ liegt weiterhin bei 0 %, so dass hier nicht von einer besseren Erfassung von Spitzenkonzentrationen durch die Verwendung kombinierter Linearer Modelle gesprochen werden kann.

Tabelle 26: Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie verschiedene LM-Delta-Ansätze auf Basis kombinierter Linearer Modelle: Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee

Metrik	CAMS HV	CAMS HV WDHD26	WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi	KFZ+ WiGe+ WiRi+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.89	2.89	2.89	2.89	2.89	2.89
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.57	0.04	0.09	0.12	0.11	0.11
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35.15	35.15	35.23	35.23	35.23	35.23
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35.13	35.32	35.27	35.38	35.50	35.25
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	119.95	119.95	119.95	119.95	119.95	119.95
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	126.87	114.82	100.43	106.33	104.63	99.42
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.45	18.45	18.45	18.45	18.45	18.45
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.51	19.19	15.84	16.14	16.31	16.07
Korrelation [-]	0.54	0.62	0.76	0.78	0.79	0.80
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.68	16.42	12.03	11.63	11.42	11.25
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-0.02	0.17	0.04	0.15	0.27	0.02
MFB [%]	-0.18	-2.48	1.72	2.06	2.11	1.76
FGE [%]	39.89	40.19	29.23	27.25	26.90	26.40
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	3136	3136	3126	3126	3126	3126
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	59.63	65.78	76.62	77.90	78.98	78.15
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	21.63	20.24	16.12	15.06	15.25	14.70
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	15	15	15	15	15	15.00
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	6.67	6.67	0.00	0.00	0.00	0.00
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.19	0.22	0.01	0.03	0.05	0.00

¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

10.1.3 Typisierte Verkehrsganglinie

Da nicht für jede Verkehrsstation aktuelle Kfz-Zählraten zur Verfügung stehen und insbesondere bei einer potentiellen operationellen Anwendung eines der beschriebenen Linearen Modelle oder einer der LM-Delta-Ansätze ggf. auch Verkehrsprognosen zum Einsatz kommen würden, wird in diesem Abschnitt untersucht, wie sensitiv die Ergebnisse der vier in Abschnitt 10.1.2.2 betrachteten LM-Delta-Ansätze auf Änderungen in den Kfz-Eingangsdaten reagieren. Dazu wurde in den Modellen Nr. 11 (KFZ, WiGe, WiRi), Nr. 15 (KFZ, WiGe, WiRi, WoTag) und Nr. 17 (KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag) die auf Zählraten beruhende Kfz-Ganglinie durch die in Abschnitt 10.1.1 beschriebene typisierte Kfz-Ganglinie der Frankfurter Allee ersetzt.

Tabelle 27 zeigt dazu die statistischen Kennwerte, wie zuvor im Vergleich mit den statistischen Kennwerten der reinen Hybrid-Vorhersage und der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für die Station DEBE065.

Im Vergleich mit den LM-Delta-Ansätzen, die die auf Zählraten beruhende Kfz-Ganglinie verwenden (Tabelle 25), wird die Güte der statistischen Kennwerte bei der Verwendung der typisierten Kfz-Ganglinie etwas reduziert. Als Konsequenz sind die statistischen Kennwerte für das Modell Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag), das keine Kfz-Daten verwendet, und das Modell Nr. 11 (KFZ, WiGe, WiRi) fast identisch, nur der modellierte Maximalwert ist mit $105.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ für das Modell Nr. 11 etwas höher als mit $100.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ für das Modell Nr. 16, während die Hit Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ mit 71.7 % für das Modell Nr. 11 etwas niedriger ist als mit 73.2 % für das Modell Nr. 16.

Wird zusätzlich zu der typisierten Kfz-Ganglinie, Windrichtung und Windgeschwindigkeit noch der Wochentag als Eingangsparameter für den LM-Delta-Ansatz hinzugenommen (Modell Nr. 15) oder Wochentag und Stunde (Modell Nr. 17), dann sind die statistischen Kennwerte etwas besser als für das Modell ohne Berücksichtigung der Kfz-Daten (Modell Nr. 16), mit Ausnahmen des modellierten Maximalwerts, der für das Modell Nr. 15 auf $103.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und für das Modell Nr. 17 auf $99.3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ absinkt.

Analog zu den Untersuchungen in Abschnitt 10.1.2 weisen die Prognosen der vier LM-Delta-Ansätze unter Verwendung der typisierten Kfz-Ganglinie für Korrelation, RMSE, FGE sowie Hit Rate und False Alarm Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bessere statistische Werte auf als die beiden aufgeführten Varianten der korrigierten CAMS-Prognosen, während Maximalwert und Standardabweichung von den korrigierten CAMS-Prognosen besser erfasst werden.

Tabelle 27: Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO₂-Konzentration unter Verwendung einer typisierten Verkehrsganglinie (KFZ_CALC): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee

Metrik	CAMS HV	CAMS HV WDHD26	WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ_CALC+ WiGe+ WiRi	KFZ_CALC+ WiGe+ WiRi+ WoTag	KFZ_CALC+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.89	2.89	2.89	2.89	2.89	2.89
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.57	0.04	0.09	0.11	0.21	0.04
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35.15	35.15	35.23	35.23	35.23	35.23
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35.13	35.32	35.27	35.24	35.24	35.24
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	119.95	119.95	119.95	119.95	119.95	119.95
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	126.87	114.82	100.43	105.91	103.88	99.33
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.45	18.45	18.45	18.45	18.45	18.45
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.51	19.19	14.93	14.94	15.14	15.20
Korrelation [-]	0.54	0.62	0.74	0.74	0.75	0.76
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.68	16.42	12.40	12.47	12.26	12.11
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-0.02	0.17	0.04	0.01	0.01	0.01
MFB [%]	-0.18	-2.48	3.33	3.33	3.12	2.97
FGE [%]	39.89	40.19	30.05	29.28	28.79	28.58
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	3136	3136	3126	3126	3126	3126
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	59.63	65.78	73.16	71.72	73.35	74.70
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	21.63	20.24	15.39	15.28	15.50	15.63
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	15	15	15	15	15	15
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	6.67	6.67	0.00	0.00	0.00	0.00
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.19	0.22	0.01	0.02	0.02	0.00

¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

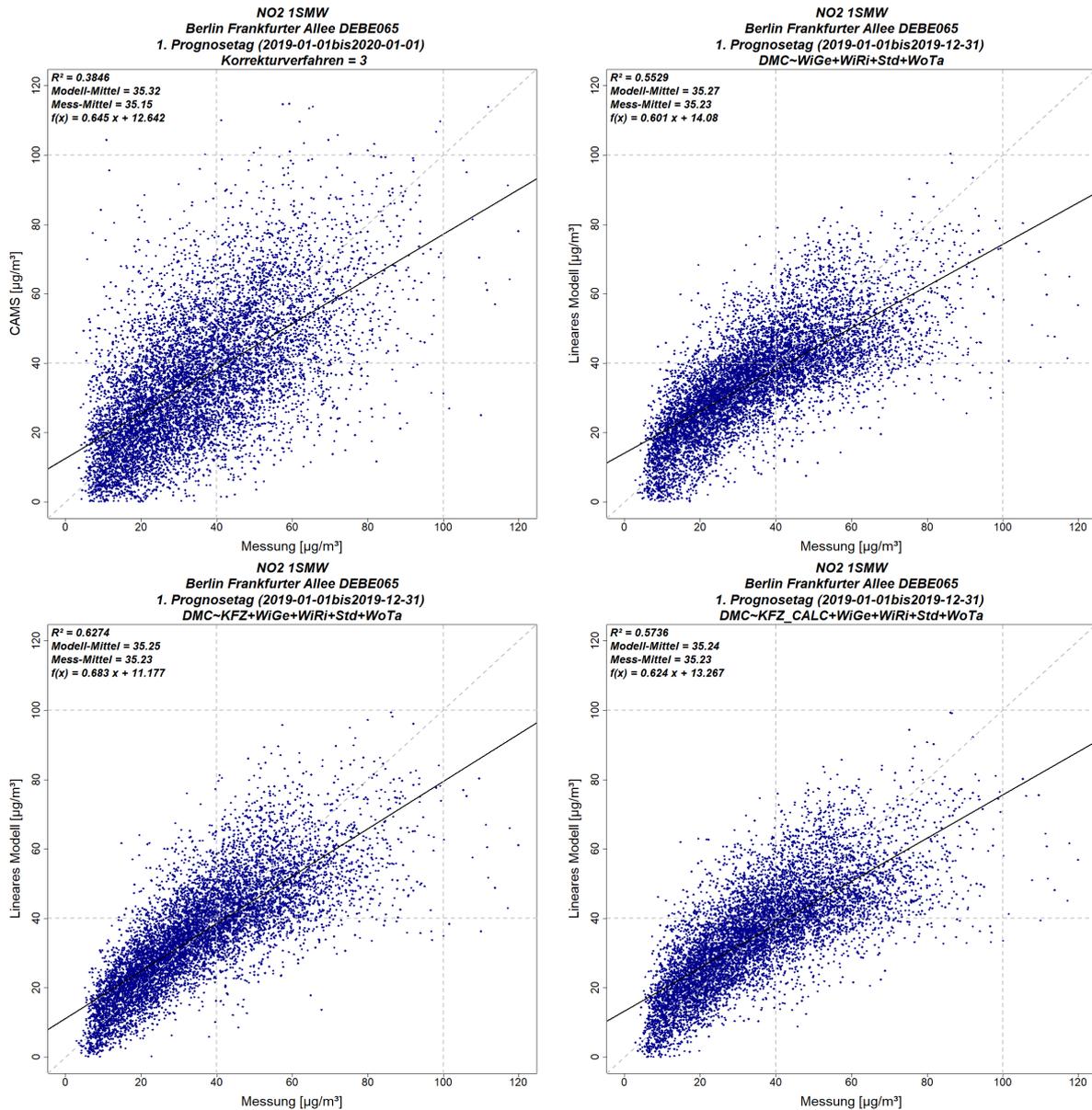
²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

In Abbildung 69 sind vier Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee für das Bezugsjahr 2019 dargestellt, oben wie bisher für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur und für den LM-Delta-Ansatz auf Basis des Linearen Modells Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag), unten hingegen ist jetzt der LM-Delta-Ansatz auf Basis des Linearen Modells Nr. 17 zweimal dargestellt, links mit der auf Zähldaten beruhenden Kfz-Ganglinie und rechts mit der typisierten Kfz-Ganglinie.

Demnach führt die Verwendung der typisierten Kfz-Ganglinie gegenüber der auf Zähldaten basierenden Ganglinie zu einer etwas stärkeren Streuung der Modell-Messwert-Paare und damit zu einem geringeren Bestimmtheitsmaß bzw. Korrelationskoeffizienten. Gleichzeitig verringert

sich auch die Steigung der Regressionsgeraden etwas. Im Vergleich mit dem LM-Delta-Ansatz auf Basis des Linearen Modells ohne Berücksichtigung von Kfz-Daten (Nr. 16) ergibt sich durch die Verwendung der typisierten Kfz-Ganglinie in Modell Nr. 17 ein etwas höheres Bestimmtheitsmaß und eine etwas größere Steigung der Regressionsgeraden.

Abbildung 69: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagkorrektur. Oben rechts: Lineares Modell WiGe+WiRi+Std+WoTag. Unten links: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag. Unten rechts: Lineares Modell KFZ_CALC+WiGe+WiRi+Std+WoTag.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

10.1.4 Windgeschwindigkeit und Windrichtung aus MOSMIX-Prognosen

Im Hinblick auf eine potentielle spätere operationelle Anwendung der LM-Delta-Ansätze aus Abschnitt 10.1.2.2 wird in diesem Abschnitt untersucht, welchen Einfluss die Verwendung prognostizierter statt gemessener meteorologischer Eingangsdaten auf die Modellergebnisse hat. Dazu wurden die in Abschnitt 10.1.1 beschriebenen MOSMIX-Daten für die Station Berlin-Tempelhof verwendet.

In Tabelle 28 sind die entsprechenden statistischen Kennwerte zusammengestellt, wie zuvor im Vergleich mit den statistischen Kennwerten der reinen Hybrid-Vorhersage und der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für die Station DEBE065.

Im Vergleich mit den LM-Delta-Ansätzen, die gemessene meteorologische Eingangsdaten verwenden (Tabelle 25), wird die Güte der statistischen Kennwerte bei der Verwendung der prognostizierten meteorologischen Eingangsdaten etwas reduziert. Beispielsweise verringert sich der Korrelationskoeffizient durchgängig über alle vier betrachteten LM-Delta-Ansätze um 2 Prozentpunkte, d. h. z. B. für das Modell Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag) von 0.74 auf 0.72 und für das Modell Nr. 17 (KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag) von 0.79 auf 0.77. Die Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ sinkt ebenfalls um 1 bis 2 Prozentpunkte, die maximale Hit Rate unter den vier betrachteten LM-Delta-Ansätzen ergibt sich mit 75.41 % für das Modell Nur. 15 (KFZ, WiGe, WiRi, WoTag). Gleichzeitig steigt die FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ geringfügig an.

Wie in den bisherigen Untersuchungen weisen die Prognosen der vier LM-Delta-Ansätze unter Verwendung der prognostizierten meteorologischen Eingangsdaten für Korrelation, RMSE, FGE sowie Hit Rate und False Alarm Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bessere statistische Werte auf als die beiden aufgeführten Varianten der korrigierten CAMS-Prognosen, während Maximalwert und Standardabweichung von den korrigierten CAMS-Prognosen besser erfasst werden. Mit Werten zwischen knapp 4 % und rund 5 % ist zudem im vorliegenden Fall der MFB sowohl gegenüber der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur als auch gegenüber den LM-Delta-Ansätzen, die gemessene meteorologische Eingangsdaten verwenden, etwas erhöht.

Tabelle 28: Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO₂-Konzentration unter Verwendung prognostizierter meteorologischer Daten (MOSMIX): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee

Metrik	CAMS HV	CAMS HV WDHD26	WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi	KFZ+ WiGe+ WiRi+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.89	2.89	2.89	2.89	2.89	2.89
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.57	0.04	0.52	0.16	0.35	0.40
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35.15	35.15	35.15	35.15	35.15	35.15
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35.13	35.32	35.18	35.15	35.16	35.16
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	119.95	119.95	119.95	119.95	119.95	119.95
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	126.87	114.82	93.34	99.00	97.65	96.08
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.45	18.45	18.45	18.45	18.45	18.45
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.51	19.19	14.03	14.71	14.95	15.07
Korrelation [-]	0.54	0.62	0.72	0.75	0.76	0.77
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	17.68	16.42	12.89	12.30	12.07	11.86
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-0.02	0.17	0.03	0.00	0.00	0.00
MFB [%]	-0.18	-2.48	5.01	4.32	3.99	3.93
FGE [%]	39.89	40.19	30.99	28.35	27.81	27.40
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	3136	3136	3136	3136	3136	3136
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	59.63	65.78	70.82	73.41	75.41	74.78
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	21.63	20.24	15.53	15.04	15.48	14.93
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	15	15	15	15	15	15
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	6.67	6.67	0.00	0.00	0.00	0.00
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.19	0.22	0.00	0.00	0.00	0.00

¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

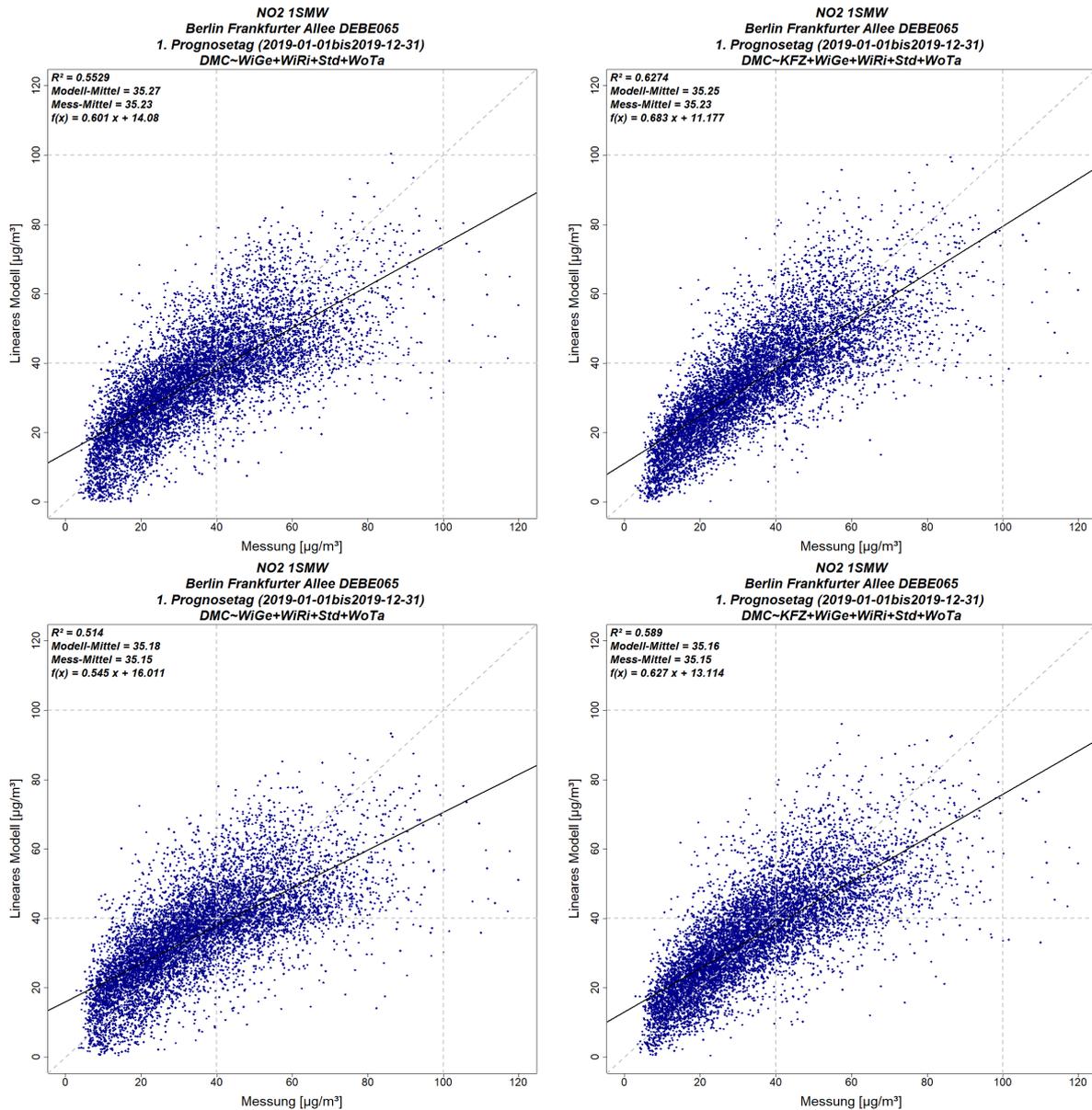
²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

Abbildung 70 zeigt vier Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte für die Station DEBE065 Berlin Frankfurter Allee für das Bezugsjahr 2019, oben für zwei LM-Delta-Ansätze unter Verwendung gemessener und unten für zwei LM-Delta-Ansätze unter Verwendung prognostizierter meteorologischer Eingangsdaten. Auf der linken Seite sind die Ergebnisse für den LM-Delta-Ansatz auf Basis des Linearen Modells Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag) und auf der rechten Seite auf Basis des Linearen Modells Nr. 17 (KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag) dargestellt.

Der optische Unterschied zwischen den Scatterplots der LM-Delta-Ansätze mit prognostizierten gegenüber denen mit gemessenen meteorologischen Eingangsdaten ist relativ gering. Das angegebene Bestimmtheitsmaß und die Regressionsgerade zeigen aber doch Unterschiede. So

sinkt das Bestimmtheitsmaß für das Modell Nr. 16 von 0.55 auf 0.51 und für das Modell Nr. 17 von 0.63 auf 0.59. Die Steigung der Regressionsgeraden reduziert sich für die beiden Modelle um 9% bzw. 7%. Damit liegt die Verringerung der Prognosegüte durch die Verwendung prognostizierter meteorologischer Daten für das Modell Nr. 17 insgesamt etwa in der gleichen Größenordnung wie bei der Verwendung der typisierten Kfz-Ganglinie in Abschnitt 10.1.3.

Abbildung 70: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben: WiGe+WiRi aus Beobachtungen. Unten: WiGe+WiRi aus MOSMIX. Links: Lineares Modell WiGe+WiRi+Std+WoTag. Rechts: Lineares Modell KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag.

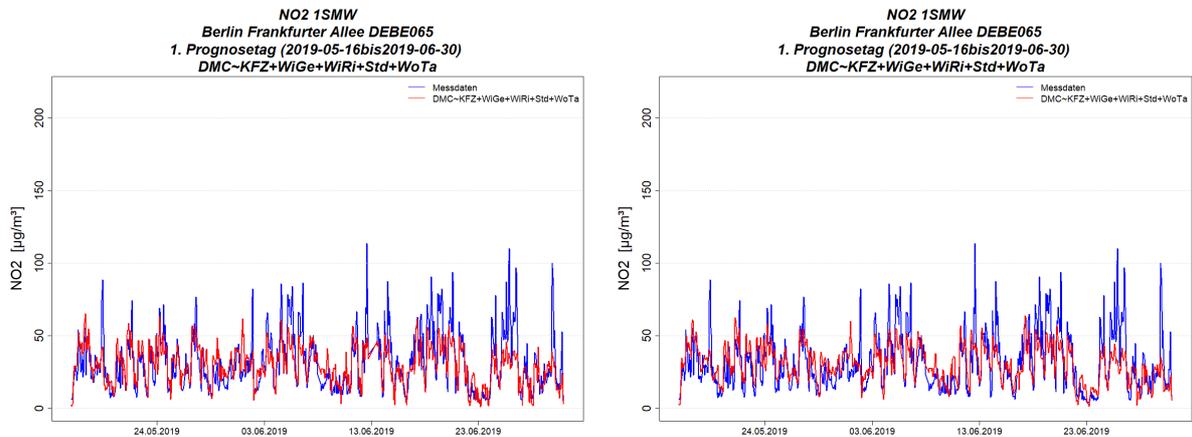


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Abbildung 71 sind die Zeitreihen der NO₂-Stundenmittelwerte für den LM-Delta-Ansatz auf Basis des Modells Nr. 17 dargestellt, links für die gemessenen und rechts für die prognostizierten meteorologischen Eingangsdaten, jeweils für die Station DEBE065 und wie bisher für den Zeitraum Mitte Mai bis Ende Juni 2019. Die Verwendung der MOSMIX-Daten führt nur in Details zu Unterschieden in der Prognose der NO₂-Konzentrationen gegenüber der Verwendung von

meteorologischen Beobachtungsdaten, der grundsätzliche zeitliche Verlauf bleibt erhalten und wird damit durch den LM-Delta-Ansatz auch mit meteorologischen Prognosedaten besser erfasst als durch die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (Abbildung 68, oben links). Gleichzeitig bleibt das Problem bestehen, dass die LM-Delta-Ansätze hohe NO_2 -Konzentrationen unterschätzen und damit auch Überschreitungen des Schwellenwerts $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ weiterhin nicht erfasst werden.

Abbildung 71: Zeitreihen der NO_2 -Stundenmittelwerte für den LM-Delta-Ansatz auf Basis des Linearen Modells KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, DEBE065 Berlin Frankfurter Allee, 1. Prognostag, Mitte Mai bis Ende Juni 2019. Links: WiGe+WiRi aus Beobachtungen. Rechts: WiGe+WiRi aus MOSMIX.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

10.2 Station DEBE063 Berlin Silbersteinstraße

Der LM-Delta-Ansatz gemäß Abschnitt 4.4.3 wurde in zwei Varianten, d. h. für die Modelle Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag) und Nr. 17 (KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag), auf die Station DEBE063 Berlin Silbersteinstraße angewendet und mit den Ergebnissen der Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für diese Station verglichen. Als meteorologische Eingangsdaten wurden dabei sowohl die Beobachtungen als auch die MOSMIX-Prognosen für Berlin-Tempelhof aus Abschnitt 10.1.1 verwendet. Als Kfz-Daten wurden testweise die ebenfalls in Abschnitt 10.1.1 beschriebenen Kfz-Zählraten für die Frankfurter Allee herangezogen.

In Tabelle 29 sind die statistischen Kennwerte der hier betrachteten Verfahren für die Station DEBE063 zusammengestellt. Der Vergleich des LM-Delta-Ansatzes mit Modell Nr. 16 und meteorologischen Beobachtungsdaten mit den beiden aufgeführten Hybrid-Vorhersagen zeigt wesentlich bessere statistische Kennwerte hinsichtlich Korrelationskoeffizient, RMSE, FGE sowie Hit Rate und False Alarm Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ für den LM-Delta-Ansatz, während Maximalwert und Standardabweichung sowie die Hit Rate mit Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ wie bisher auch besser von den beiden Hybrid-Vorhersagen erfasst werden. Die Hinzunahme der Kfz-Daten aus der Frankfurter Allee zum LM-Delta-Ansatz (d. h. Modell Nr. 17) führt nochmals zu einer Verbesserung der statistischen Kennwerte mit einem Korrelationskoeffizienten von 0.81 und einer Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ von knapp 89 % bei gegenüber der Hybrid-Vorhersage um fast 10 Prozentpunkte gesenkter FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Maximalwert und Standardabweichung sowie die Hit Rate mit Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ werden aber weiterhin besser von den beiden Hybrid-Vorhersagen erfasst.

Die Verwendung prognostizierter statt gemessener meteorologischer Eingangsdaten führt wie schon an der Station DEBE065 in Abschnitt 10.1.4 zu einer leichten Abnahme der Prognosegüte, soweit sie durch die statistischen Kennwerte beurteilt wird. So reduziert sich beispielsweise der Korrelationskoeffizient gegenüber dem LM-Delta-Ansatz mit meteorologischen Beobachtungsdaten um rund 4 Prozentpunkte und die Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ um knapp 3 Prozentpunkte, während die FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ um 1 bis 1.4 Prozentpunkte ansteigt. Das Verhältnis zu den beiden aufgeführten Hybrid-Vorhersagen ändert sich nicht.

Tabelle 29: Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie zwei verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO_2 -Konzentration unter Verwendung gemessener („Meteo aus Messung“) bzw. prognostizierter meteorologischer Daten („Meteo aus MOSMIX“): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBE063 Berlin Silbersteinstraße

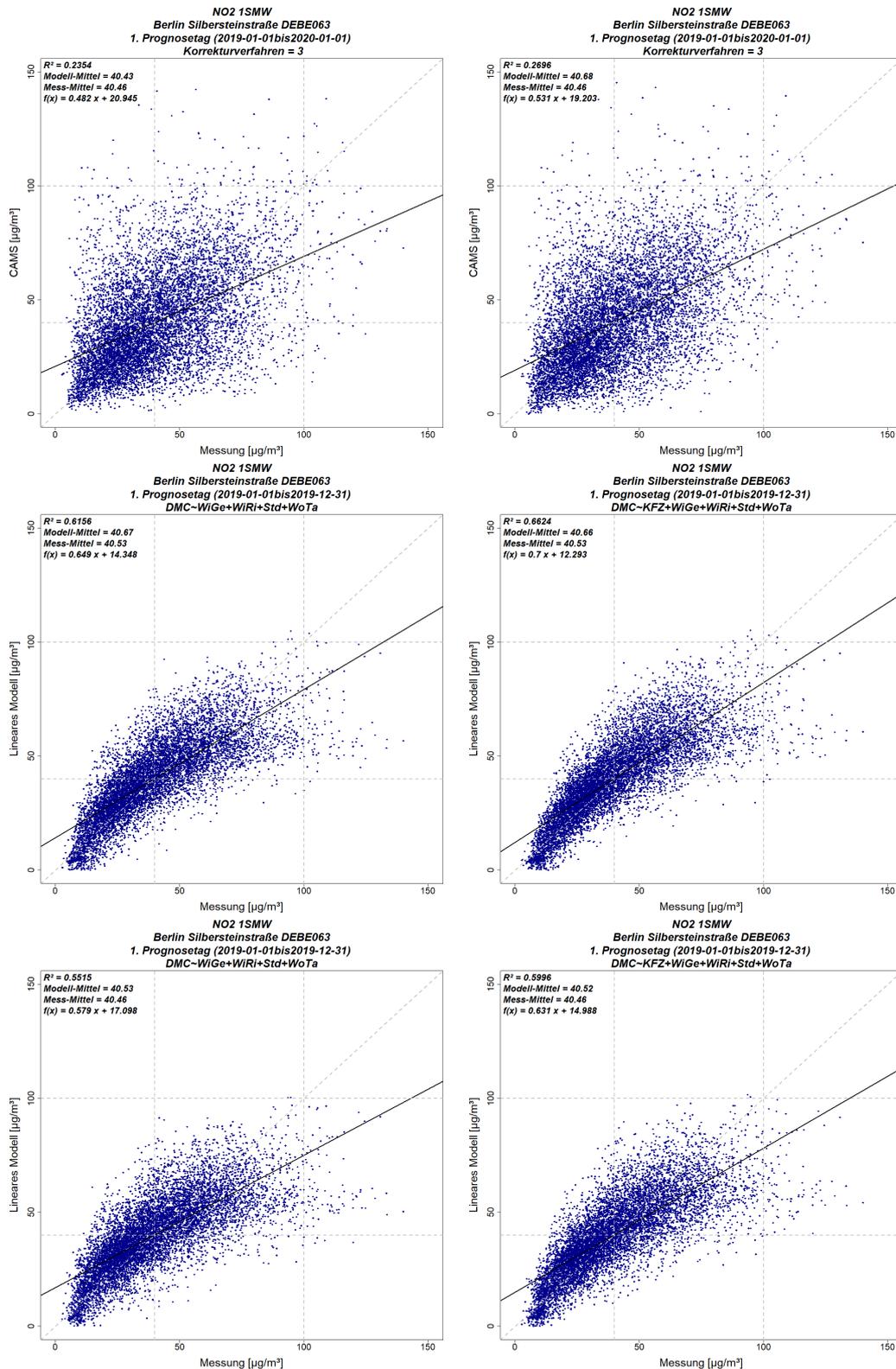
Metrik	CAMS HV	CAMS HV WDHD26	Meteo aus Messung:	Meteo aus Messung:	Meteo aus MOSMIX:	Meteo aus MOSMIX:
			WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2.73	2.73	2.73	2.73	2.73	2.73
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.78	0.03	0.06	0.04	0.23	0.03
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	40.46	40.46	40.53	40.53	40.46	40.46
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	40.43	40.68	40.67	40.66	40.53	40.52
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	140.05	140.05	140.05	140.05	140.05	140.05
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	142.35	145.35	104.82	105.18	100.33	101.54
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	21.23	21.23	21.25	21.25	21.23	21.23
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	21.07	21.70	17.59	18.28	16.55	17.30
Korrelation [-]	0.49	0.52	0.78	0.81	0.74	0.77
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	21.46	21.05	13.21	12.39	14.24	13.46
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-0.04	0.22	0.14	0.14	0.06	0.05
MFB [%]	-0.08	-1.10	2.12	1.03	3.90	2.72
FGE [%]	41.04	41.91	26.35	24.65	28.08	26.49
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	3872	3872	3860	3860	3872	3872
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	65.55	68.93	87.36	88.65	84.38	86.00
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	27.93	28.33	20.91	18.96	21.87	20.38
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	88	88	88	88	88	88
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	14.77	15.91	2.27	2.27	0.00	0.00
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.85	0.86	0.05	0.05	0.02	0.02

¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

Abbildung 72 zeigt die Scatterplots für die Station DEBE063 und die in Tabelle 29 betrachteten Verfahren. Die Scatterplots für die beiden Varianten der Hybrid-Vorhersage zeigen die breite Streuung der Modell-Messwert-Paare, die mit dem niedrigen Bestimmtheitsmaß von 0.24 bzw. 0.27 einhergeht. Werden meteorologische Beobachtungsdaten verwendet, dann weist der LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 16 ein Bestimmtheitsmaß von knapp 0.62 auf, und die Steigung der Regressionsgeraden nimmt im Vergleich mit den beiden Hybrid-Vorhersagen deutlich zu. Durch Berücksichtigung der Kfz-Daten der Frankfurter Allee (LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 17) reduziert sich die Streuung der Modell-Messwert-Paare auch optisch weiter, und das Bestimmtheitsmaß steigt auf rund 0.66. Die Verwendung der prognostizierten meteorologischen Daten in den beiden LM-Delta-Ansätzen verringert das Bestimmtheitsmaß und die Steigung der Regressionsgeraden wieder, insbesondere das Bestimmtheitsmaß liegt aber mit 0.55 bzw. 0.60 weiterhin deutlich höher als für die beiden Hybrid-Vorhersagen.

Abbildung 72: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEBE063 Berlin Silbersteinstraße, 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Mitte links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Mitte rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Unten links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. Unten rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX.

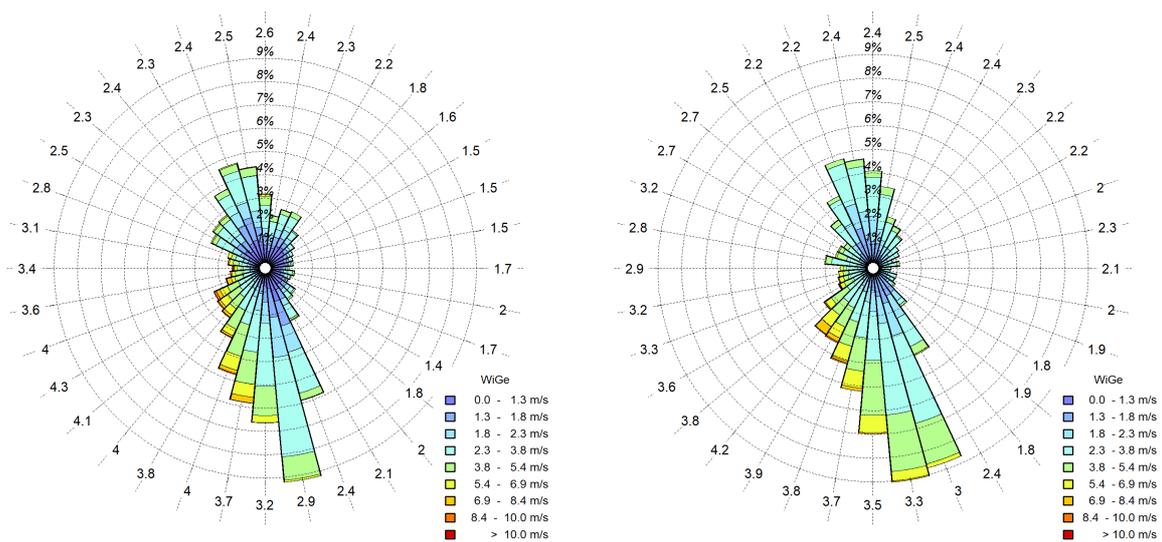


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

10.3 Station DEBW098 Mannheim Friedrichsring

Analog zu Abschnitt 10.2 wurde der LM-Delta-Ansatz in den zwei Varianten mit Modell Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag) und Nr. 17 (Kfz, WiGe, WiRi, Std, WoTag) auf die Station DEBW098 Mannheim Friedrichsring angewendet und mit den Ergebnissen der Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für diese Station verglichen. Als meteorologische Eingangsdaten wurden dabei sowohl die Beobachtungen für die DWD-Messstation Mannheim verwendet als auch die vom DWD für Mannheim zur Verfügung gestellten MOSMIX-Prognosen. Die zugehörigen Windrosen sind in Abbildung 73 dargestellt und zeigen eine gute Übereinstimmung. Als Kfz-Daten wurden wieder testweise die in Abschnitt 10.1.1 beschriebenen Kfz-Zählraten für die Frankfurter Allee in Berlin herangezogen.

Abbildung 73: Windrosen Mannheim, 2019. Links: Messdaten. Rechts: MOSMIX-Prognose.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Tabelle 30 sind die statistischen Kennwerte der betrachteten Verfahren für die Station DEBW098 aufgeführt. Der Vergleich des LM-Delta-Ansatzes mit Modell Nr. 16 und meteorologischen Beobachtungsdaten mit den beiden aufgeführten Hybrid-Vorhersagen zeigt analog zu den bisherigen Untersuchungen bessere statistische Kennwerte hinsichtlich Korrelationskoeffizient, RMSE, FGE sowie Hit Rate und False Alarm Rate mit Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ für den LM-Delta-Ansatz, während Maximalwert und Standardabweichung sowie die Hit Rate mit Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ besser von den beiden Hybrid-Vorhersagen erfasst werden. Die Hinzunahme der Kfz-Daten aus der Frankfurter Allee zum LM-Delta-Ansatz (d. h. Modell Nr. 17) führt nochmals zu einer Verbesserung der statistischen Kennwerte, obwohl die Daten nicht vom Standort der Station DEBW098 stammen. So ergibt sich für den LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 17 ein Korrelationskoeffizient von 0.68 und eine Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ von rund 78 %. Gleichzeitig sinkt die FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ gegenüber den beiden Hybrid-Vorhersagen um 6 bzw. 8 Prozentpunkte. Maximalwert und Standardabweichung sowie die Hit Rate mit Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ werden aber weiterhin besser von den beiden Hybrid-Vorhersagen erfasst. So erreicht die Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur bei der Hit Rate mit Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ knapp 33 %, während beide LM-Delta-Ansätze mit gemessenen meteorologischen Eingangsdaten knapp 10 % erreichen.

Die Verwendung prognostizierter statt gemessener meteorologischer Eingangsdaten führt wie schon an den Stationen DEBE065 (Abschnitt 10.1.4) und DEBE063 (Abschnitt 10.2) zu einer leichten Abnahme der Prognosegüte. So reduziert sich der Korrelationskoeffizient gegenüber dem LM-Delta-Ansatz mit meteorologischen Beobachtungsdaten um 2 bis 3 Prozentpunkte und die Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ um ca. 0.6 Prozentpunkte, während die FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ um 1 bis knapp 2 Prozentpunkte ansteigt. Das Verhältnis zu den beiden aufgeführten Hybrid-Vorhersagen ändert sich nicht.

Tabelle 30: Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie zwei verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO₂-Konzentration unter Verwendung gemessener („Meteo aus Messung“) bzw. prognostizierter meteorologischer Daten („Meteo aus MOSMIX“): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBW098 Mannheim Friedrichsring

Metrik	CAMS HV	CAMS HV WDHD26	Meteo aus Messung:	Meteo aus Messung:	Meteo aus MOSMIX:	Meteo aus MOSMIX:
			WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	4.00	4.00	4.00	4.00	4.00	4.00
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.70	0.37	2.53	3.96	7.25	7.79
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	42.37	42.37	42.15	42.15	42.37	42.37
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	42.44	42.60	42.15	42.15	42.37	42.37
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	188.80	188.80	188.80	188.80	188.80	188.80
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	182.79	176.36	126.74	129.53	124.85	127.27
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.42	18.42	18.24	18.24	18.42	18.42
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	19.27	20.17	14.77	15.33	14.13	14.69
Korrelation [-]	0.54	0.58	0.65	0.68	0.62	0.66
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	18.13	17.71	14.16	13.63	14.66	14.16
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.06	0.22	0.00	0.00	0.00	0.00
MFB [%]	-1.11	-2.28	3.31	2.66	4.12	3.57
FGE [%]	34.96	34.38	25.73	24.55	26.42	25.14
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	4208	4208	4096	4096	4208	4208
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	67.16	69.42	76.05	78.30	75.40	77.66
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	32.44	30.51	25.31	24.55	26.30	26.40
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	67	67	61	61	67	67
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	29.85	32.84	9.84	9.84	7.46	7.46
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.68	0.58	0.06	0.07	0.05	0.06

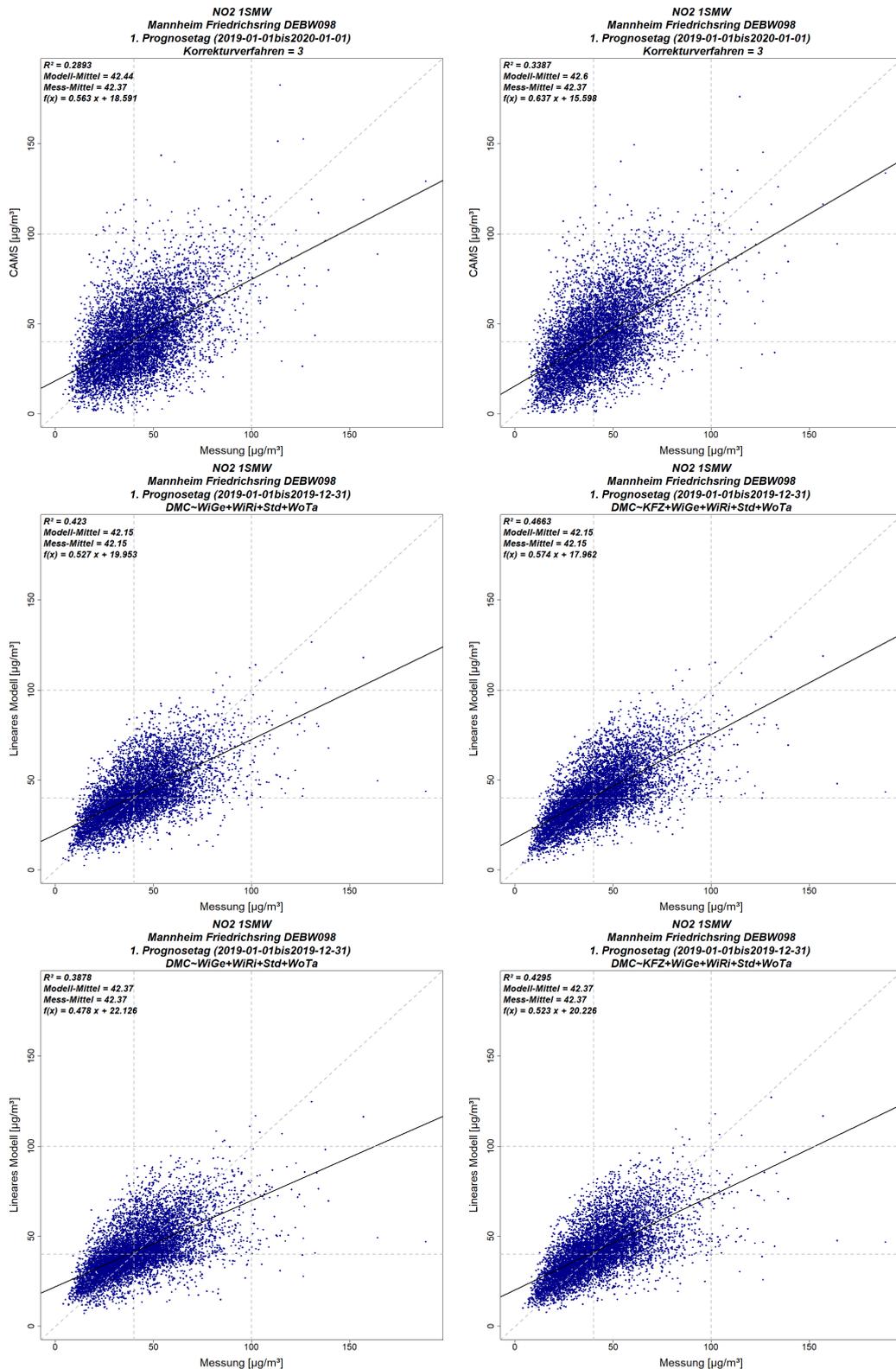
¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

In Abbildung 74 sind die Scatterplots für die Station DEBW098 und die in Tabelle 30 betrachteten Verfahren dargestellt. Das Bestimmtheitsmaß für die beiden Varianten der Hybrid-Vorhersage liegt hier bei 0.29 bzw. 0.34 und damit etwas höher als für die Station DEBE063. Werden meteorologische Beobachtungsdaten verwendet, dann weist der LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 16 ein Bestimmtheitsmaß von 0.42 auf, die Steigung der Regressionsgeraden nimmt jedoch im Vergleich mit den beiden Hybrid-Vorhersagen ab. Durch Berücksichtigung der Kfz-Daten der Frankfurter Allee (LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 17) erhöht sich das Bestimm-

heitsmaß auf knapp 0.47, die Steigung der Regressionsgeraden erreicht dabei etwa das Niveau der reinen Hybrid-Vorhersage. Die Verwendung der prognostizierten meteorologischen Daten in den beiden LM-Delta-Ansätzen verringert das Bestimmtheitsmaß und die Steigung der Regressionsgeraden wieder. Das Bestimmtheitsmaß liegt mit knapp 0.39 bzw. 0.43 über den Werten für die beiden Hybrid-Vorhersagen, die Steigung der Regressionsgeraden ist aber in beiden Fällen niedriger.

Abbildung 74: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEBW098 Mannheim Friedrichsring, 1. Prognostag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Mitte links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Mitte rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Unten links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. Unten rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX.

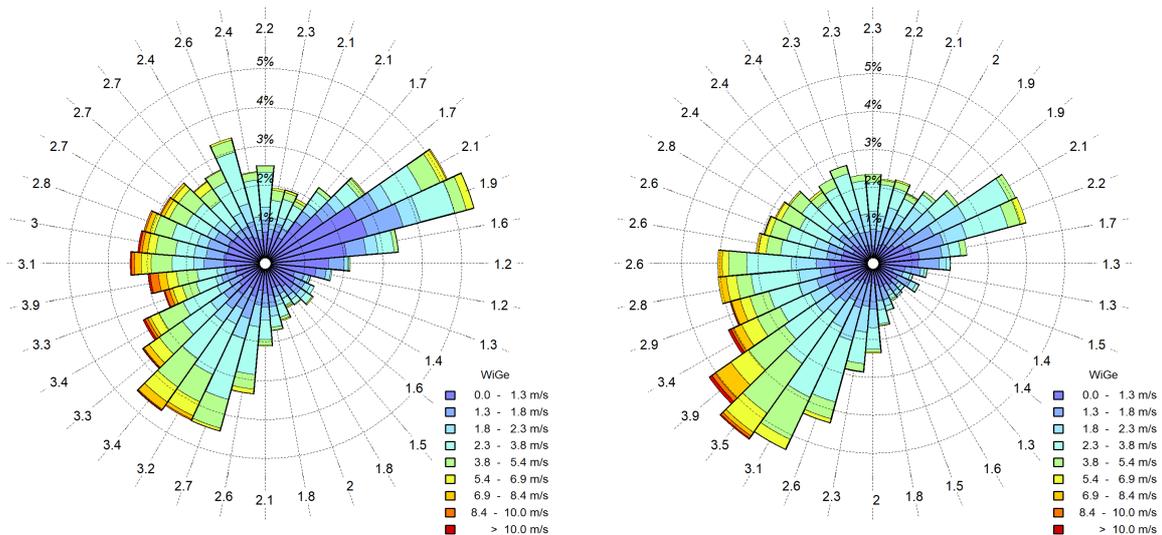


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

10.4 Station DEBW116 Stuttgart Hohenheimer Straße

Analog zu den beiden vorherigen Abschnitten wurde der LM-Delta-Ansatz in den zwei Varianten mit Modell Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag) und Nr. 17 (KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag) auf die Station DEBW116 Stuttgart Hohenheimer Straße angewendet und mit den Ergebnissen der Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für diese Station verglichen. Als meteorologische Eingangsdaten wurden dabei sowohl die Beobachtungen für die DWD-Messstation Stuttgart Echterdingen verwendet als auch die vom DWD für Stuttgart-Echterdingen zur Verfügung gestellten MOSMIX-Prognosen. Die zugehörigen Windrosen sind in Abbildung 75 dargestellt und zeigen eine recht gute Übereinstimmung. Als Kfz-Daten wurden aufgrund der bisherigen guten Erfahrungen die in Abschnitt 10.1.1 beschriebenen Kfz-Zählraten für die Frankfurter Allee in Berlin herangezogen.

Abbildung 75: Windrosen Stuttgart Echterdingen, 2019. Links: Messdaten. Rechts: MOSMIX-Prognose.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

Tabelle 31 zeigt die statistischen Kennwerte der betrachteten Verfahren für die Station DEBW116. Der Vergleich des LM-Delta-Ansatzes mit Modell Nr. 16 und meteorologischen Beobachtungsdaten mit den beiden aufgeführten Hybrid-Vorhersagen zeigt anders als bei den bisherigen Untersuchungen bessere statistische Kennwerte für den LM-Delta-Ansatz nur hinsichtlich RMSE, FGE und Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Der Korrelationskoeffizient liegt mit 0.64 knapp über dem für die reine Hybrid-Vorhersage, aber niedriger als der Korrelationskoeffizient für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Und während die Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ für den LM-Delta-Ansatz über 91 % beträgt und damit 10 Prozentpunkte höher liegt als für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur, liegt die FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bei rund 44 % und damit deutlich höher als für die beiden Hybrid-Vorhersagen. Maximalwert, Standardabweichung sowie die Hit Rate mit Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ werden wie bisher besser von den beiden Hybrid-Vorhersagen erfasst werden.

Die Hinzunahme der Kfz-Daten aus der Frankfurter Allee zum LM-Delta-Ansatz (d. h. Modell Nr. 17) führt auch hier zu einer Verbesserung der statistischen Kennwerte, obwohl die Daten nicht vom Standort der Station DEBW116 stammen. So ergibt sich für den LM-Delta-Ansatz mit Modell

Nr. 17 ein Korrelationskoeffizient von 0.67, der aber immer noch unter dem der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für diese Station liegt. Auch die FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ liegt mit 39 % immer noch über der für die beiden Hybrid-Vorhersagen.

Die Verwendung prognostizierter statt gemessener meteorologischer Eingangsdaten führt hier nur zu einer geringfügigen Abnahme der Prognosegüte. So reduziert sich der Korrelationskoeffizient gegenüber dem LM-Delta-Ansatz mit meteorologischen Beobachtungsdaten um 1 bis 2 Prozentpunkte, während die Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ fast konstant bleibt. Das Verhältnis zu den beiden aufgeführten Hybrid-Vorhersagen ändert sich nicht.

Tabelle 31: Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie zwei verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO₂-Konzentration unter Verwendung gemessener („Meteo aus Messung“) bzw. prognostizierter meteorologischer Daten („Meteo aus MOSMIX“): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBW116 Stuttgart Hohenheimer Straße

Metrik	CAMS HV	CAMS HV WDHD26	Meteo aus Messung:	Meteo aus Messung:	Meteo aus MOSMIX:	Meteo aus MOSMIX:
			WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	4.30	4.30	4.30	4.30	4.30	4.30
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.81	0.02	1.53	4.05	4.88	4.61
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	50.71	50.71	50.71	50.71	50.71	50.71
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	50.76	50.76	50.71	50.71	50.71	50.71
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	233.50	233.50	233.50	233.50	233.50	233.50
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	225.73	220.83	128.82	133.24	131.70	138.26
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	24.33	24.33	24.33	24.33	24.33	24.33
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	24.32	25.24	17.68	18.46	17.35	18.18
Korrelation [-]	0.63	0.68	0.64	0.67	0.62	0.66
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	20.83	19.89	18.91	18.20	19.19	18.47
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.05	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
MFB [%]	0.19	-1.63	5.01	4.59	5.50	5.03
FGE [%]	33.29	32.66	28.09	25.78	28.48	26.26
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	5300	5300	5300	5300	5300	5300
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	78.21	81.40	91.13	91.51	91.06	91.53
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	36.08	31.72	44.37	39.06	45.76	39.19
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	319	319	319	319	319	319
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	40.44	44.83	10.97	12.54	10.34	11.29
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	2.29	2.52	0.68	0.71	0.59	0.71

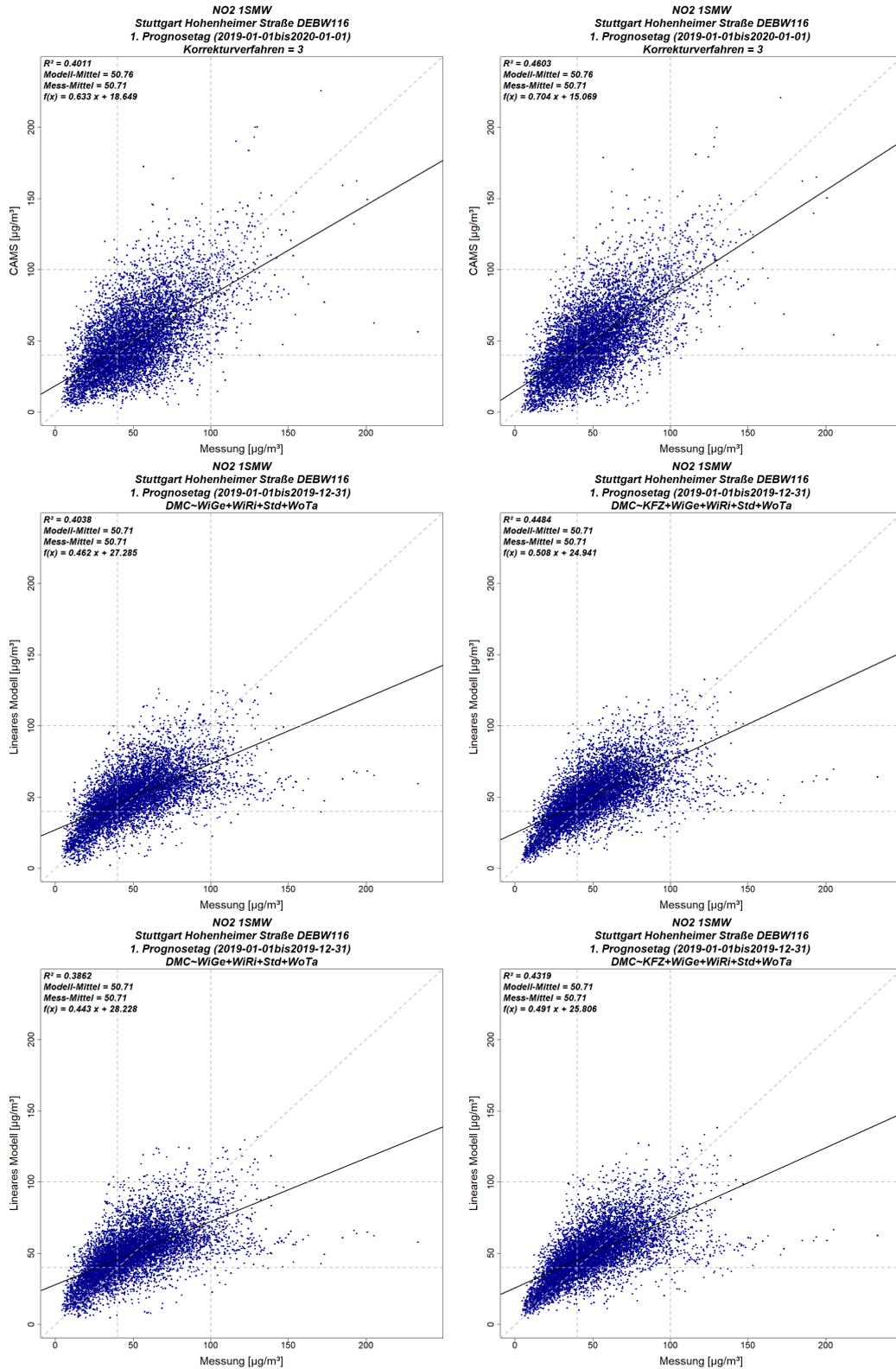
¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

In Abbildung 76 sind die Scatterplots für die Station DEBW116 und die in Tabelle 31 aufgeführten Verfahren dargestellt. Das Bestimmtheitsmaß für die beiden Varianten der Hybrid-Vorhersage liegt hier bei 0.40 bzw. 0.46 und damit deutlich höher als für die bisher betrachteten Stationen. Auch die Steigung der Regressionsgeraden ist im Vergleich mit den bisher betrachteten Stationen relativ hoch. Werden meteorologische Beobachtungsdaten verwendet, dann weist der LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 16 ebenfalls ein Bestimmtheitsmaß von 0.40 auf, die Steigung der Regressionsgeraden ist jedoch im Vergleich mit den beiden Hybrid-Vorhersagen deutlich

niedriger. Durch Berücksichtigung der Kfz-Daten der Frankfurter Allee (LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 17) erhöht sich das Bestimmtheitsmaß auf knapp 0.45, was weiterhin unter dem Bestimmtheitsmaß der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur liegt. Die Verwendung der prognostizierten meteorologischen Daten in den beiden LM-Delta-Ansätzen verringert das Bestimmtheitsmaß und die Steigung der Regressionsgeraden wieder. Das Bestimmtheitsmaß liegt mit knapp 0.39 bzw. 0.43 nur im zweiten Fall über den Werten für die reine Hybrid-Vorhersage, die Steigung der Regressionsgeraden bleibt in beiden Fällen niedriger. Auffällig ist in diesem Zusammenhang der Ast mit Modell-Messwert-Paaren, der sich für Messwerte zwischen $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und $230 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ergibt, für die die LM-Delta-Ansätze Werte zwischen $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und $70 \mu\text{g}/\text{m}^3$ berechnen und der vermutlich einen wesentlichen Grund für die geringere Prognosegüte der LM-Delta-Ansätze im Vergleich mit den an dieser Station gut abschneidenden Hybrid-Verfahren darstellt.

Abbildung 76: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEBW116 Stuttgart Hohenheimer Str., 1. Prognosestag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Mitte links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Mitte rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Unten links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. Unten rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX.

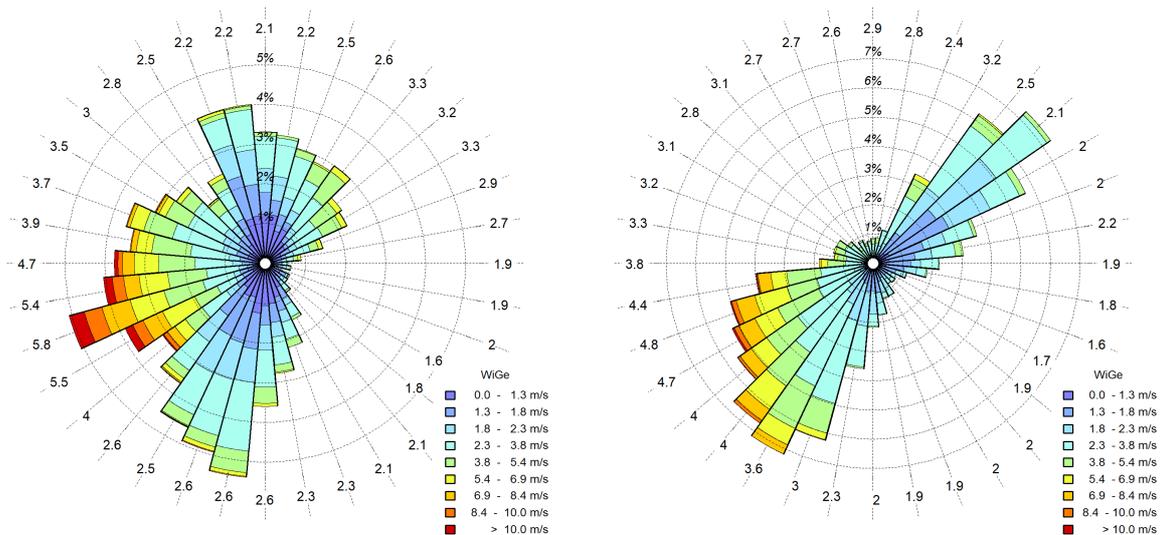


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

10.5 Station DEBW152 Heilbronn Weinsberger Straße Ost

Auch für die Station DEBW152 Heilbronn Weinsberger Straße Ost wurde der LM-Delta-Ansatz in den zwei Varianten mit Modell Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag) und Nr. 17 (KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag) angewendet und mit den Ergebnissen der Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für diese Station verglichen. Als meteorologische Eingangsdaten wurden dabei zum einen die Beobachtungen für die DWD-Messstation Heilbronn verwendet. Zum anderen wurden vom DWD MOSMIX-Daten für den Interpolationspunkt⁴ Heilbronn zur Verfügung gestellt. Die zugehörigen Windrosen sind in Abbildung 77 dargestellt, sie zeigen relevante Unterschiede in der Windrichtungs- und Windgeschwindigkeitsverteilung. Als Kfz-Daten wurden aufgrund der bisherigen guten Erfahrungen auch hier die in Abschnitt 10.1.1 beschriebenen Kfz-Zählraten für die Frankfurter Allee in Berlin herangezogen.

Abbildung 77: Windrosen Heilbronn, 2019. Links: Messdaten, Station Heilbronn/Neckar. Rechts: MOSMIX-Prognose, Interpolationspunkt Heilbronn.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Tabelle 32 sind die statistischen Kennwerte der betrachteten Verfahren für die Station DEBW152 aufgeführt. Der Vergleich des LM-Delta-Ansatzes mit Modell Nr. 16 und meteorologischen Beobachtungsdaten mit den beiden aufgeführten Hybrid-Vorhersagen zeigt bessere statistische Kennwerte für den LM-Delta-Ansatz hinsichtlich Korrelationskoeffizient, RMSE, FGE und Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Der Korrelationskoeffizient liegt dabei mit 0.71 nur knapp über dem für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Die Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ beträgt für den LM-Delta-Ansatz knapp 92 % und liegt damit rund 9 Prozentpunkte höher als für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Die FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ hingegen liegt mit rund 34 % höher als für die beiden Hybrid-Vorhersagen, wo sie rund 31 % bzw. 25 % beträgt. Auch Maximalwert, Standardabweichung sowie die Hit Rate mit Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ werden wie bisher besser von den beiden Hybrid-Vorhersagen erfasst. So liegt die Hit Rate mit Schwellenwert

⁴ Als Interpolationspunkt werden in MOSMIX Punkte bezeichnet, für die die Prognose der meteorologischen Daten nicht auf der Basis von MOS-Koeffizienten erfolgt, die aus historischen Beobachtungen und Modelldaten explizit für diesen Ort entwickelt wurden, sondern für die die Prognose mittels Interpolation von benachbarten Stationen, für die entsprechende MOS-Koeffizienten erstellt werden, berechnet wird.

100 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur bei 37 % und damit deutlich höher als für den LM-Delta-Ansatz mit 2 %.

Die Hinzunahme der Kfz-Daten aus der Frankfurter Allee zum LM-Delta-Ansatz (d. h. Modell Nr. 17) führt wieder zu einer Verbesserung der statistischen Kennwerte, obwohl die Daten nicht vom Standort der Station DEBW152 stammen. So ergibt sich für den LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 17 ein Korrelationskoeffizient von 0.75 und eine FAR für den Schwellenwert 40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ von rund 29 %, die damit geringfügig niedriger liegt als für die reine Hybrid-Vorhersage.

Die Verwendung prognostizierter statt gemessener meteorologischer Eingangsdaten im LM-Delta-Ansatz führt hier wie an der Station DEBW116 (Abschnitt 10.4) nur zu einer geringfügigen Abnahme der Prognosegüte. So reduziert sich der Korrelationskoeffizient gegenüber dem LM-Delta-Ansatz mit meteorologischen Beobachtungsdaten um 1 bis 2 Prozentpunkte, während die Hit Rate für den Schwellenwert 40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ fast konstant bleibt. Das Verhältnis zu den beiden aufgeführten Hybrid-Vorhersagen ändert sich nur bezüglich des Korrelationskoeffizienten für den LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 16, der mit 0.69 jetzt unter dem für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur liegt.

Tabelle 32: Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie zwei verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO₂-Konzentration unter Verwendung gemessener („Meteo aus Messung“) bzw. prognostizierter meteorologischer Daten („Meteo aus MOSMIX“): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBW152 Heilbronn Weinsberger Straße Ost

Metrik	CAMS HV	CAMS HV WDHD26	Meteo aus Messung:	Meteo aus Messung:	Meteo aus MOSMIX:	Meteo aus MOSMIX:
			WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	1.10	1.10	1.10	1.10	1.10	1.10
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.34	0.10	0.07	0.01	0.33	0.05
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	47.76	47.76	47.76	47.76	47.76	47.76
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	47.78	47.99	47.79	47.78	47.77	47.77
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	151.40	151.40	151.40	151.40	151.40	151.40
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	148.75	149.68	121.09	117.79	118.91	119.52
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	24.16	24.16	24.16	24.16	24.16	24.16
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	24.53	25.70	19.25	20.22	18.99	20.03
Korrelation [-]	0.63	0.70	0.71	0.75	0.69	0.74
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	21.04	19.20	17.23	16.12	17.64	16.50
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.01	0.22	0.03	0.02	0.01	0.00
MFB [%]	-0.53	-2.49	3.96	2.81	4.38	3.37
FGE [%]	37.67	35.56	31.44	28.56	32.17	28.87
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	4905	4905	4905	4905	4905	4905
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	78.06	82.87	91.97	92.38	91.87	91.72
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	30.96	25.47	34.03	29.40	35.18	29.81
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	198	198	198	198	198	198
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	30.81	37.37	2.02	2.53	1.52	3.03
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	1.73	2.25	0.42	0.44	0.34	0.42

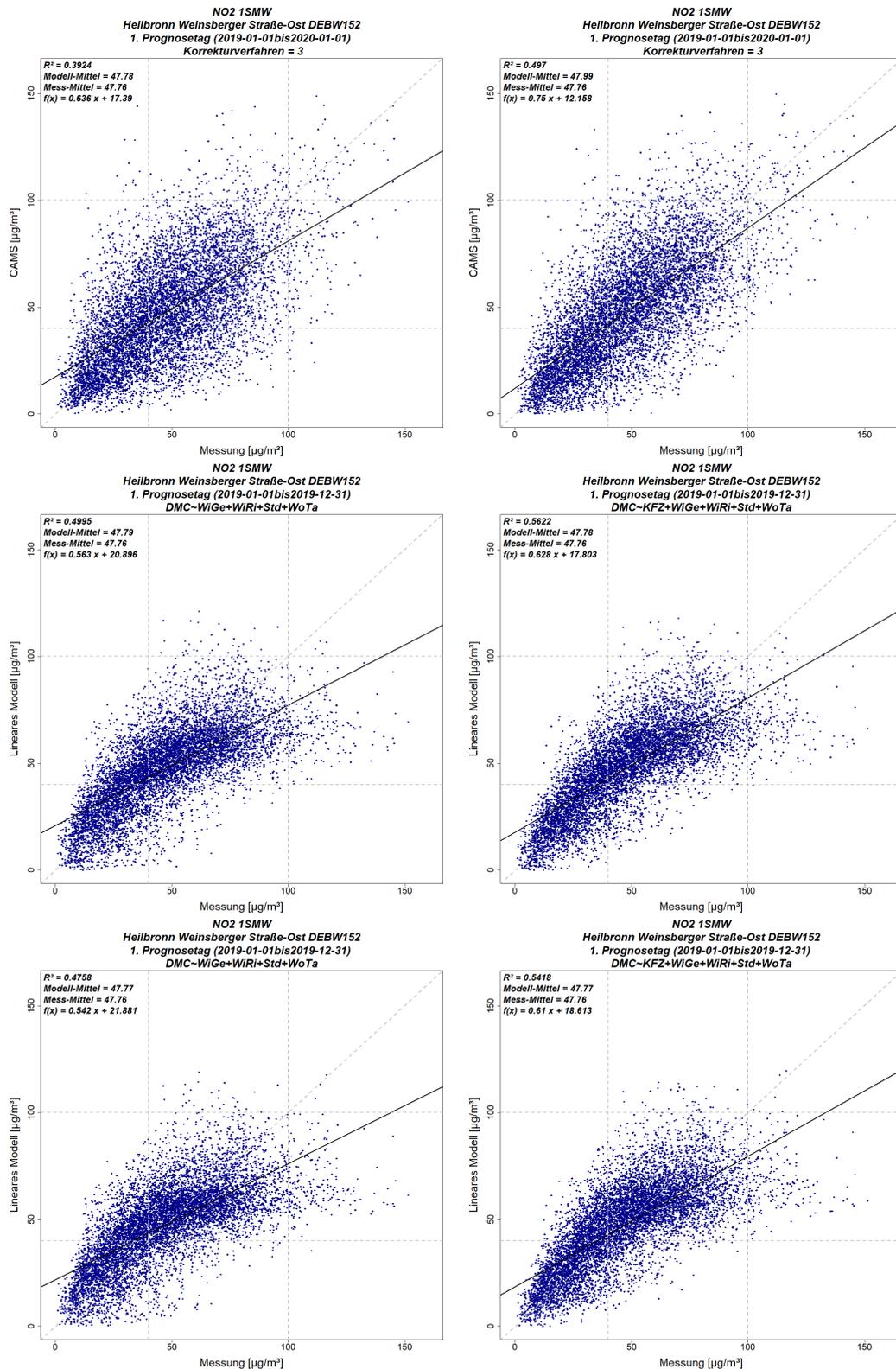
¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

Abbildung 78 zeigt die Scatterplots für die Station DEBW152 und die in Tabelle 32 aufgeführten Verfahren. Das Bestimmtheitsmaß für die beiden Varianten der Hybrid-Vorhersage liegt hier bei 0.39 bzw. knapp 0.5 und damit für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur nochmals höher als für die Station DEBW116 (vgl. Abschnitt 10.4). Auch die Steigung der Regressionsgeraden ist ähnlich hoch wie für die Station DEBW116. Werden meteorologische Beobachtungsdaten verwendet, dann weist der LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 16 ebenfalls ein

Bestimmtheitsmaß von 0.5 auf, die Steigung der Regressionsgeraden ist jedoch im Vergleich mit den beiden Hybrid-Vorhersagen deutlich niedriger. Durch Berücksichtigung der Kfz-Daten der Frankfurter Allee (LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 17) erhöht sich das Bestimmtheitsmaß auf 0.56, und die Steigung der Regressionsgeraden nähert sich dem Wert für die reine Hybrid-Vorhersage an. Die Verwendung der prognostizierten meteorologischen Daten in den beiden LM-Delta-Ansätzen verringert das Bestimmtheitsmaß auf knapp 0.48 bzw. 0.54. Die Steigung der Regressionsgeraden bleibt in beiden Fällen niedriger als für die beiden Hybrid-Vorhersagen. Ähnlich wie an der Station DEBW116, wenn auch nicht so ausgeprägt, ergibt sich auch hier wieder ein Ast mit Modell-Messwert-Paaren für Messwerte zwischen ca. $110 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$, für die die LM-Delta-Ansätze Werte zwischen ca. $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und $90 \mu\text{g}/\text{m}^3$ berechnen und der negative Auswirkungen auf die für die LM-Delta-Ansätze berechneten statistischen Kennwerte hat.

Abbildung 78: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEBW152 Heilbronn Weinsberger Str., 1. Prognosetag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Mitte links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Mitte rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Unten links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. Unten rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX.

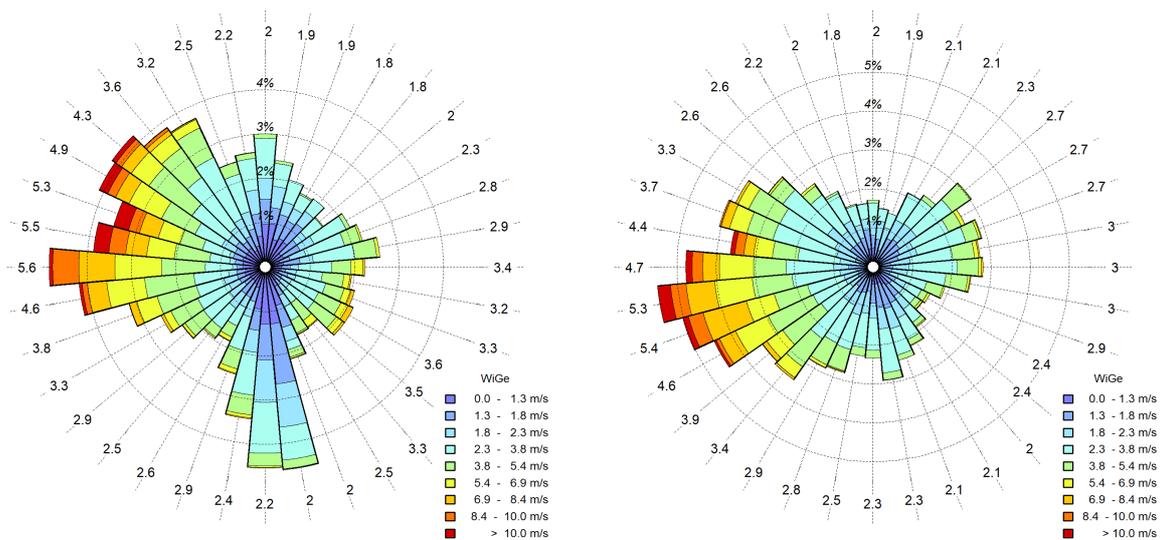


Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

10.6 Station DEBY119 Würzburg Stadtring Süd

Wie für die bisherigen Stationen wurde der LM-Delta-Ansatz in den zwei Varianten mit Modell Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag) und Nr. 17 (Kfz, WiGe, WiRi, Std, WoTag) auf die Station DEBY119 Würzburg Stadtring Süd angewendet und mit den Ergebnissen der Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für diese Station verglichen. Als meteorologische Eingangsdaten wurden dabei die Beobachtungen für die DWD-Messstation Würzburg und die vom DWD für Würzburg zur Verfügung gestellten MOSMIX-Prognosen verwendet. Die zugehörigen Windrosen in Abbildung 79 zeigen Unterschiede zum einen in der Ausrichtung der Hauptwindrichtungen in Ost-West-Richtung und zum anderen hinsichtlich des prominenten Astes in Nord-Süd-Richtung in den Messdaten, der in den MOSMIX-Daten nicht wiedergegeben wird. Als Kfz-Daten wurden wieder die in Abschnitt 10.1.1 beschriebenen Kfz-Zählraten für die Frankfurter Allee in Berlin herangezogen.

Abbildung 79: Windrosen Würzburg, 2019. Links: Messdaten. Rechts: MOSMIX-Prognose.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

In Tabelle 33 sind die statistischen Kennwerte der betrachteten Verfahren für die Station DEBY119 zusammengestellt. Der Vergleich des LM-Delta-Ansatzes mit Modell Nr. 16 und meteorologischen Beobachtungsdaten mit den beiden aufgeführten Hybrid-Vorhersagen zeigt bessere statistische Kennwerte für den LM-Delta-Ansatz hinsichtlich Korrelationskoeffizient, RMSE, FGE und FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Der Korrelationskoeffizient liegt dabei mit 0.65 um 10 Prozentpunkte über dem für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Die Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ hingegen beträgt hier für den LM-Delta-Ansatz nur rund 46 % und liegt damit rund 10 Prozentpunkte niedriger als für die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Auch Maximalwert und Standardabweichung werden wie bisher besser von den beiden Hybrid-Vorhersagen wiedergegeben. Die vier beobachteten Überschreitungen des Schwellenwerts von $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ werden von keinem der in Tabelle 33 aufgeführten Ansätze erfasst.

Die Hinzunahme der Kfz-Daten aus der Frankfurter Allee zum LM-Delta-Ansatz (d. h. Modell Nr. 17) führt wie bisher zu einer Verbesserung der statistischen Kennwerte, obwohl die Daten nicht vom Standort der Station DEBY119 stammen. So ergibt sich für den LM-Delta-Ansatz mit

Modell Nr. 17 ein Korrelationskoeffizient von 0.69 und eine Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ von knapp 51 %, die damit geringfügig über der für die reine Hybrid-Vorhersage liegt.

Die Verwendung prognostizierter statt gemessener meteorologischer Eingangsdaten führt wie an den Stationen DEBE065 (Abschnitt 10.1.4) und DEBE063 (Abschnitt 10.2) zu einer leichten Abnahme der Prognosegüte. So reduziert sich der Korrelationskoeffizient gegenüber dem LM-Delta-Ansatz mit meteorologischen Beobachtungsdaten um 2 bis 3 Prozentpunkte und die Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ um ca. 2.5 Prozentpunkte. Das Verhältnis zu den beiden aufgeführten Hybrid-Vorhersagen ändert sich nur bezüglich der Hit Rate für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ für den LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 17, der mit rund 48 % jetzt unter der entsprechenden Hit Rate für die reine Hybrid-Vorhersage liegt.

Tabelle 33: Hybrid-Vorhersage (HV), Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur (HV WDHD26) sowie zwei verschiedene LM-Delta-Ansätze zur Prognose der NO₂-Konzentration unter Verwendung gemessener („Meteo aus Messung“) bzw. prognostizierter meteorologischer Daten („Meteo aus MOSMIX“): Vergleich der statistischen Kennwerte für die Station DEBY119 Würzburg Stadtring Süd

Metrik	CAMS HV	CAMS HV WDHD26	Meteo aus Messung:	Meteo aus Messung:	Meteo aus MOSMIX:	Meteo aus MOSMIX:
			WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	WiGe+ WiRi+Std+ WoTag	KFZ+ WiGe+ WiRi+Std+ WoTag
Min Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	1.88	1.88	1.88	1.88	1.88	1.88
Min Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.37	0.02	0.09	0.27	0.06	1.31
Mean Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	30.50	30.50	30.53	30.53	30.50	30.50
Mean Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	30.47	30.65	30.54	30.54	30.50	30.50
Max Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	114.14	114.14	114.14	114.14	114.14	114.14
Max Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	105.28	100.81	82.60	81.11	80.86	80.71
SD Obs [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	15.28	15.28	15.29	15.29	15.28	15.28
SD Mod [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	15.46	16.26	11.06	11.53	10.59	11.08
Korrelation [-]	0.50	0.55	0.65	0.69	0.63	0.66
RMSE [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	15.37	14.94	11.62	11.17	11.88	11.45
BIAS [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	-0.03	0.15	0.01	0.01	0.00	0.00
MFB [%]	-0.63	-2.23	5.17	4.82	6.05	5.69
FGE [%]	40.88	41.30	30.79	29.25	31.35	29.91
MeasExc ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [-]	2116	2116	2096	2096	2116	2116
Hit Rate ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	50.52	56.19	46.28	50.91	43.76	48.44
FAR ($40 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ¹ [%]	14.83	15.65	8.69	8.71	8.52	8.55
MeasExc ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [-]	4	4	4	4	4	4
Hit Rate ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
FAR ($100 \mu\text{g}/\text{m}^3$) ² [%]	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

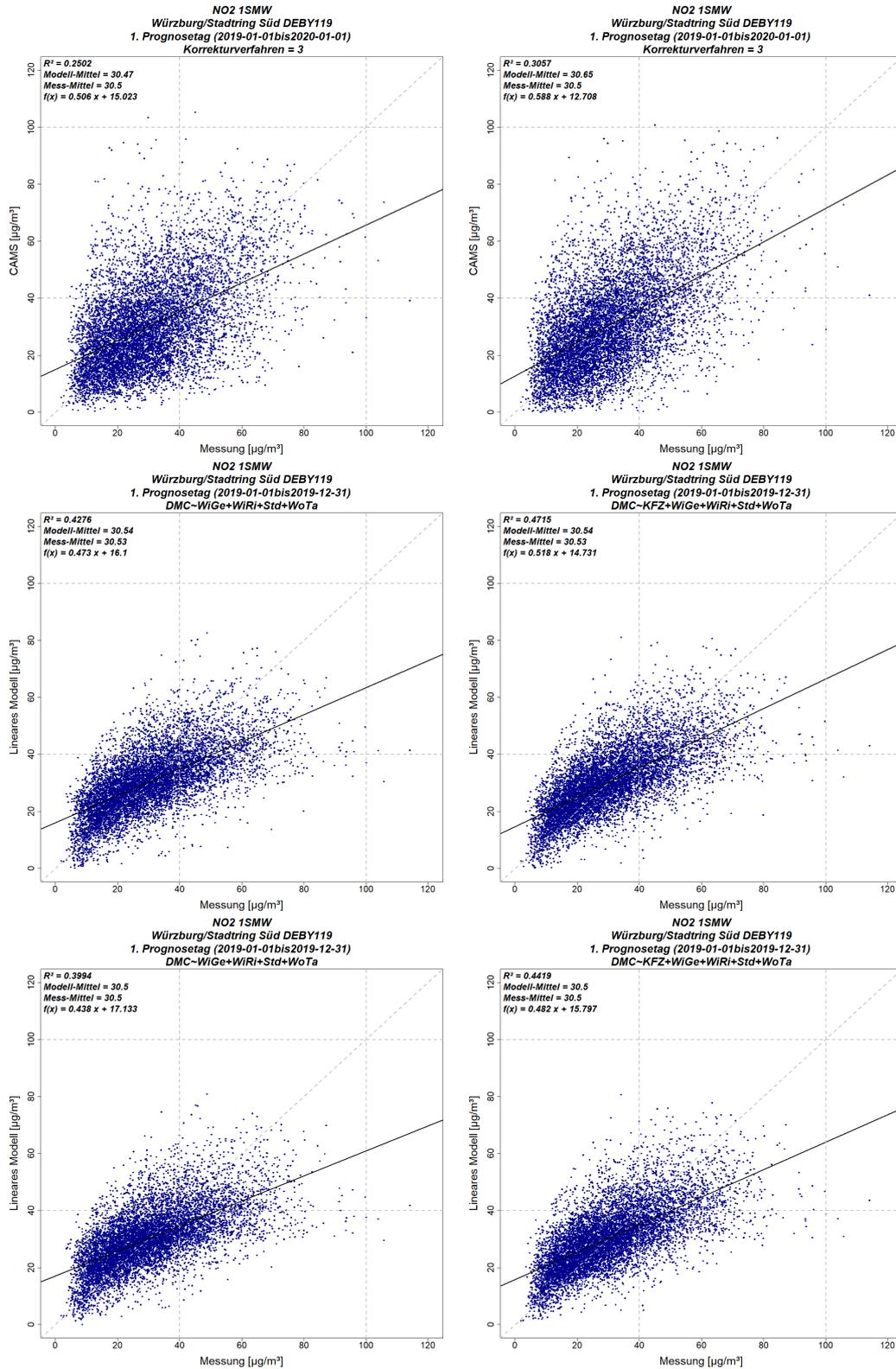
¹: Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „gut“ → „mäßig“)

²: Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Übergang Luftqualitätsindex „mäßig“ → „schlecht“)

Abbildung 80 zeigt die Scatterplots für die Station DEBY119 und die in Tabelle 33 aufgeführten Verfahren. Das Bestimmtheitsmaß für die beiden Varianten der Hybrid-Vorhersage liegt hier mit 0.25 bzw. knapp 0.31 ähnlich wie an der Station DEBE063 (Abschnitt 10.2) relativ niedrig. Werden meteorologische Beobachtungsdaten verwendet, dann weist der LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 16 ein Bestimmtheitsmaß von knapp 0.43 auf, die Steigung der Regressionsgeraden ist jedoch im Vergleich mit den beiden Hybrid-Vorhersagen niedriger. Durch Berücksichtigung der Kfz-Daten der Frankfurter Allee (LM-Delta-Ansatz mit Modell Nr. 17) erhöht sich das

Bestimmtheitsmaß auf 0.47, und für die Steigung der Regressionsgeraden ergibt sich ein etwas höherer Wert als für die reine Hybrid-Vorhersage. Die Verwendung der prognostizierten meteorologischen Daten in den beiden LM-Delta-Ansätzen verringert das Bestimmtheitsmaß auf 0.40 bzw. 0.44, und die Steigung der Regressionsgeraden ist in beiden Fällen niedriger als für die beiden Hybrid-Vorhersagen.

Abbildung 80: Scatterplots der NO₂-Stundenmittelwerte, DEBY119 Würzburg Stadtring Süd, 1. Prognostag, Bezugsjahr 2019. Oben links: reine Hybrid-Vorhersage. Oben rechts: Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur. Mitte links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Mitte rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus Messung. Unten links: WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX. Unten rechts: KFZ+WiGe+WiRi+Std+WoTag, Meteo aus MOSMIX.



Quelle: eigene Darstellung, IVU Umwelt GmbH

10.7 Fazit

In Abschnitt 4.4 wurde mit Hilfe der Multivariaten Regressionsanalyse gezeigt, dass ein statistisch signifikanter Zusammenhang besteht zwischen den an einer verkehrsnahen Luftmessstation gemessenen NO₂-Konzentrationen und den Größen Windrichtung, Windgeschwindigkeit, Verkehrsstärke, Stunde und Wochentag. In der Erweiterung dieses Vorgehens wurde gezeigt, dass auch zwischen den Differenzen zwischen den NO₂-CAMS-Prognosen am Stationsort und den gemessenen NO₂-Konzentrationen und den genannten Größen ein statistisch signifikanter Zusammenhang besteht.

Für die vier Parameterkombinationen mit dem höchsten Erklärungswert in Abschnitt 4.4 (vgl. Tabelle 3 und Tabelle 4: Modelle Nr. 11 (KFZ, WiGe, WiRi), Nr. 15 (KFZ, WiGe, WiRi, WoTag), Nr. 16 (WiGe, WiRi, Std, WoTag) und Nr. 17 (KFZ, WiGe, WiRi, Std, WoTag)) wurden lineare Modellansätze erstellt. Mit diesen wurden NO₂-Prognosen am Stationsort erstellt, zunächst auf Basis von Beobachtungsdaten („best case“), dann unter Variation der Verkehrsdaten und unter Verwendung prognostizierter meteorologischer Daten.

Die Ergebnisse haben gezeigt, dass sich für die linearen Modellansätze, die auf der Prognose der Differenzen zwischen den NO₂-CAMS-Prognosen am Stationsort und den gemessenen NO₂-Konzentrationen beruhen und die im folgenden als „LM-Delta-Ansätze“ bezeichnet wurden (Abschnitt 4.4.3), im Regelfall bessere statistische Kennwerte ergeben als für die Linearen Modellen aus Abschnitt 4.4.2, die die NO₂-Konzentrationen direkt und ohne Beteiligung von CAMS-Daten prognostizieren. Für die weiteren Untersuchungen wurden daher ausschließlich die LM-Delta-Ansätze verwendet.

Im Vergleich mit den Ergebnissen der reinen Hybrid-Vorhersage und der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur wird einerseits der zeitliche Verlauf der NO₂-Konzentrationen durch die Prognose der LM-Delta-Ansätze im Regelfall besser erfasst. Daraus ergeben sich an einigen Stationen wie z. B. DEBE065, DEBE063 und DEBW098 wesentlich bessere statistische Kennwerte für die LM-Delta-Ansätze hinsichtlich Korrelationskoeffizient bzw. Bestimmtheitsmaß, RMSE, FGE sowie Hit Rate und FAR für den niedrigeren Schwellenwert 40 µg/m³. An anderen Stationen wie DEBW116 und DEBW152, die bereits durch die betrachteten Varianten der Hybrid-Vorhersage gut wiedergegeben werden, liegt der Korrelationskoeffizient für die LM-Delta-Ansätze in der gleichen Größenordnung wie für die Hybrid-Vorhersagen oder knapp darunter, und die FAR für den Schwellenwert 40 µg/m³ fällt für die LM-Delta-Ansätze schlechter aus als für die Hybrid-Vorhersagen.

Andererseits wurde bei der Untersuchung der Ergebnisse deutlich, dass die Prognosen der LM-Delta-Ansätze hohe Konzentrationswerte häufig deutlich unterschätzen, dass also durch die Linearen Modelle eine zu starke Dämpfung der Variabilität der Konzentrationen stattfindet, was sich auch in der zu niedrigen Standardabweichung der LM-Delta-Ansätze widerspiegelt. Dies wirkt sich negativ auf die Hit Rate mit dem höheren Schwellenwert 100 µg/m³ aus, die für die LM-Delta-Ansätze in allen betrachteten Fällen sehr gering ausfällt. Von der Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentags- und Feiertagskorrektur hingegen werden die hohen Konzentrationswerte besser erfasst, so dass die mit den Hybrid-Vorhersagen erzielte Hit Rate für den Schwellenwert 100 µg/m³ an den hier untersuchten Stationen besser ausfällt als für die LM-Delta-Ansätze.

Um speziell die hohen NO₂-Konzentrationen besser erfassen zu können, wurden testweise wie in Abschnitt 4.4.4 beschrieben für jeden LM-Delta-Ansatz jeweils zwei Lineare Modelle bestimmt, das erste für alle Stunden des Tages und das zweite spezifisch nur für diejenigen Tagesstunden, in denen 5 % oder mehr der Fälle auftreten, in denen die Differenz zwischen CAMS-Prognose am Stationsort und gemessener NO₂-Konzentration > 50 µg/m³ beträgt. Für diese Tagesstunden

wurden dann die berechneten Differenzen aus dem zweiten Linearen Modell für den LM-Delta-Ansatz übernommen, während für die anderen Tagesstunden die berechneten Differenzen aus dem ersten Linearen Modell verwendet wurden. Durch die Anwendung dieses LM-Delta-Ansatzes mit kombiniertem Linearen Modell ergeben sich zwar für die meisten statistischen Kennwerte leichte Verbesserungen, die am deutlichsten für das Lineare Modell ausfallen, das keine Kfz-Daten berücksichtigt. Eine bessere Erfassung von Spitzenkonzentrationen bzw. eine Erhöhung der Hit Rate für den Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ durch diesen Ansatz kann aber nicht festgestellt werden.

Hinsichtlich der Sensitivität der Prognoseergebnisse bezüglich der Kfz-Daten wurde gezeigt, dass Kfz-Daten grundsätzlich zu einer Verbesserung der Prognose beitragen, dass aber auch ohne Kfz-Daten noch gute Ergebnisse mit dem LM-Delta-Ansatz erzielt werden können, wenn alle anderen untersuchten Eingangsgrößen (Windrichtung, Windgeschwindigkeit, Stunde, Wochentag) berücksichtigt werden. Die Verwendung einer typisierten Kfz-Ganglinie anstatt der auf Zähldaten beruhenden Kfz-Ganglinie führte zumindest an der Frankfurter Allee in Berlin, für die die Zähldaten erhoben wurden, zu einer nur leichten Minderung der Prognosegüte. Umgekehrt führte die Verwendung der auf Zähldaten beruhenden Kfz-Ganglinie für die Frankfurter Allee auch an den anderen untersuchten Standorten in Mannheim, Stuttgart, Heilbronn und Würzburg zu einer Verbesserung der statistischen Kennwerte gegenüber dem LM-Delta-Ansatz ohne Berücksichtigung von Kfz-Daten.

Die Verwendung prognostizierter MOSMIX-Daten statt gemessener meteorologischer Daten in den LM-Delta-Ansätzen führt im Regelfall zu einer leichten Abnahme der Prognosegüte. Eine Abhängigkeit der Minderung der Prognosegüte der LM-Delta-Ansätze von der Prognosegüte der MOSMIX-Daten konnte aufgrund der geringen Anzahl betrachteter Stationen nicht festgestellt werden.

11 Zusammenfassung und Ausblick

Im vorliegenden Projekt wurden die Testumgebung und das Online-Tool, die im Rahmen des Refoplan-Vorhabens „Sicherstellung der Ozonprognose“ (IVU Umwelt, 2018) zur Verbesserung der Ozon- und PM₁₀-Prognose an Area-Stationen implementiert wurden, um folgende Punkte erweitert:

- ▶ Berücksichtigung von NO₂, insbesondere auch, was in der Testumgebung die Evaluierung von Schwellenwertüberschreitungen betrifft,
- ▶ Differenzierung der Evaluierung bzw. Prognose nach Stationstypen, d. h. nach der Stationsklassifizierung des UBA (Spot/Area) und speziell für die Testumgebung zusätzlich nach EoI (EG, 1997),
- ▶ verkehrsspezifische Erweiterungen der Hybrid-Vorhersage, d. h. Implementierung der Wochentags- und der Feiertagskorrektur.

Die Interpolation der an den Stationsorten berechneten Korrekturwerte in die Fläche, die das Online-Tool durchführt, beruht dabei ausschließlich auf den Korrekturwerten, die für die als „Area“ klassifizierten Stationen berechnet werden. Korrekturwerte an Spot-Stationen fließen nicht in die Interpolation und flächenhafte Korrektur der CAMS-Prognosen ein.

In Kapitel 7 wurde gezeigt, dass die in IVU Umwelt (2018) für die operationelle Anwendung am UBA implementierte Hybrid-Vorhersage auch bei der Anwendung auf NO₂ und PM₁₀ zu einer Verbesserung der Prognosegüte im Vergleich mit den reinen CAMS-Prognosen führt, und zwar sowohl an Area- als auch an Spot- bzw. Verkehrsstationen. Dadurch, dass bei der verwendeten Form der Hybrid-Vorhersage die CAMS-Prognosen mit der Differenz zwischen Messung und Modell von einem oder mehreren Vortagen korrigiert werden, tritt allerdings ein zeitlicher Verzug gegenüber den Messungen auf, mit dem einzelne Spitzenwerte oder hochbelastete Episoden durch die korrigierte Prognose erfasst werden. Die Größe des zeitlichen Verzugs entspricht für den 1. Prognosetag der Anzahl der verwendeten Vorlaufstage. Wenn wie im vorliegenden Projekt $n_{\text{Vorlauf}} = 1$ Tag verwendet wird, dann beträgt der zeitliche Verzug für den 1. Prognosetag einen Tag. Dieser zeitliche Verzug kommt aufgrund der stärkeren Variabilität der Zeitreihen bei NO₂ und insbesondere an den Verkehrsstationen stärker zum Tragen als bei PM₁₀ und an den Area-Stationen (Abschnitt 7.5).

Die dynamische Evaluierung der Zeitreihen mit dem FAIRMODE-Delta-Tool hat zudem ergeben, dass zwar die mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Tag und Nacht sowie zwischen Sommer und Winter, die von den unkorrigierten CAMS-Prognosen nicht korrekt erfasst werden, nach Anwendung der Hybrid-Vorhersage gut durch die prognostizierten Daten beschrieben werden, dass aber die Anwendung der Hybrid-Vorhersage hinsichtlich der mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Wochentag und Wochenende zu einer Verschlechterung der Darstellung führt.

Eine Analyse der Korrekturwerte der Hybrid-Vorhersage hat gezeigt, dass diese an Standorten verkehrsnaher Messstationen im Mittel häufig eine Wochentagsabhängigkeit aufweisen, wenn gemäß Abschnitt 4.1 $n_{\text{Vorlauf}} = 1$ Tag gesetzt wird (siehe Abschnitt 4.2). Darauf basierend wurde eine Wochentagskorrektur für die Hybrid-Vorhersage entwickelt, deren Anwendung in Kapitel 8 für PM₁₀ und NO₂ an Spot- bzw. Verkehrsstationen untersucht wurde. Bei der dynamischen Evaluierung ergibt sich damit eine deutlich bessere Übereinstimmung der modellierten mittleren Konzentrationsdifferenzen zwischen Wochentag und Wochenende mit den mittleren Differenzen der Messwerte als für die reine CAMS-Prognose oder die reine Hybrid-Vorhersage. Allerdings hat die weitere statistische Auswertung der Hybrid-Vorhersage

mit Wochentagskorrektur, d. h. die statistischen Kennwerte und die Modellierungsqualitäts-Indikatoren aus dem FAIRMODE-DELTA-Tool, keine relevanten Verbesserungen der Vorhersagegüte für PM₁₀ an Spot-Stationen gezeigt, so dass die Anwendung der Wochentagskorrektur hierfür nicht empfohlen wird. Bei NO₂ hingegen führt die Anwendung der Wochentagskorrektur an Verkehrsstationen bei ausreichendem Mittelungszeitraum ($n \geq 12$ Wochen) zu konkreten Verbesserungen gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage. Die Verwendung der Wochentagskorrektur im Zusammenhang mit der Hybrid-Vorhersage mit $n_{Vorlauf} = 1$ Tag wird daher für verkehrsnahen NO₂-Messstationen grundsätzlich empfohlen (Abschnitt 8.3).

Analog zur Wochentagskorrektur wurde in Abschnitt 4.3 eine Feiertagskorrektur entwickelt, die auf Feiertage unter der Woche (Montag bis Freitag) angewendet wird und diese Feiertage wie einen Sonntag aus der Wochentagskorrektur behandelt. Die sich daraus ergebenden statistischen Verbesserungen gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage bzw. der Hybrid-Vorhersage mit Wochentagskorrektur sind dabei aufgrund der geringen Anzahl Feiertage unter der Woche, auf die die Feiertagskorrektur angewendet wird, bezogen auf ein ganzes Jahr von untergeordneter Bedeutung. Der Einfluss der Feiertagskorrektur auf den einzelnen Feiertag ist aber durchaus relevant. Es wird daher empfohlen, die Feiertagskorrektur im Zusammenhang mit der Hybrid-Vorhersage mit $n_{Vorlauf} = 1$ Tag und in Kombination mit der Wochentagskorrektur für verkehrsnahen NO₂-Messstationen zu verwenden (siehe Abschnitt 9.2).

Technisch betrachtet wurden die Wochentags- und Feiertagskorrektur im Rahmen dieses Projekts sowohl in der Testumgebung als auch im „Online-Tool Ozonprognose“ zur Korrektur der CAMS-Prognosen im operationellen Betrieb (siehe Kapitel 1) so umgesetzt, dass sie sowohl jeweils allein als auch in Kombination miteinander zur Hybrid-Vorhersage zugeschaltet werden können. Basierend auf den Auswertungen im vorliegenden Bericht wurde sowohl in der Testumgebung als auch im Online-Tool die reine Hybrid-Vorhersage als Standard-Korrekturverfahren für die PM₁₀-Area- und Spot-Stationen und die NO₂-Area-Stationen hinterlegt und die Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur für die NO₂-Spot-Stationen. Die Erweiterung der Anwendung der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur von NO₂-Verkehrsstationen auf NO₂-Spot-Stationen wurde dabei aus operationellen Gründen vorgenommen. Untersuchungen im Vorfeld der Berichterstellung haben gezeigt, dass die Anwendung der Hybrid-Vorhersage mit Wochentags- und Feiertagskorrektur auf Spot-Stationen, die keine Verkehrsstationen nach EoI (EG, 1997) darstellen (sondern z. B. industriennahe oder Hintergrundstationen), zwar ggf. keinen großen Nutzen gegenüber der reinen Hybrid-Vorhersage bringt, aber im Regelfall auch keine relevante Minderung der Prognosegüte herbeiführt. Eine Änderung der oben genannten Standard-Einstellungen zum Korrekturverfahren in Testumgebung und Online-Tool ist jederzeit möglich.

Mit den LM-Delta-Ansätzen in Abschnitt 4.4 wurde ein vielversprechender Ansatz zur Prognose der NO₂-Konzentrationen an verkehrsnahen Messstationen entwickelt, der auf einer multivariaten Regressionsanalyse stündlich aufgelöster Daten mindestens von Windrichtung und Windgeschwindigkeit sowie von Wochentag und Stunde des Tages beruht. Die Berücksichtigung stündlich aufgelöster Kfz-Daten verbessert die Prognosegüte des Ansatzes weiter. Erste Sensitivitätsstudien, die mit Blick auf eine potentielle operationelle Anwendung durchgeführt wurden, haben gezeigt, dass zum einen die Kfz-Daten nicht notwendigerweise vom betrachteten Stationsort stammen müssen, um einen positiven Effekt auf die Prognosegüte zu erzielen, und dass zum anderen die Verwendung prognostizierter meteorologischer Daten des DWD („MOSMIX-Daten“) gegenüber der Verwendung beobachteter meteorologischer Daten im Regelfall nur zu einer leichten Abnahme der Prognosegüte führt (siehe Abschnitt 10.7).

Vorteil der LM-Delta-Ansätze gegenüber der Hybrid-Vorhersage ohne und mit Wochentagskorrektur ist, dass der zeitliche Verlauf der NO₂-Konzentrationen durch die Prognose der LM-

Delta-Ansätze im Regelfall besser erfasst wird. Daraus ergeben sich an einigen Stationen wesentlich bessere statistische Kennwerte für die LM-Delta-Ansätze hinsichtlich Korrelationskoeffizient bzw. Bestimmtheitsmaß, RMSE, FGE sowie Hit Rate und FAR für den Schwellenwert $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Abschnitt 10.7). Nachteil ist, dass hohe Konzentrationswerte von den LM-Delta-Ansätzen im Regelfall deutlich unterschätzt werden, was sich negativ auf die Standardabweichung und auf die Hit Rate mit Schwellenwert $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auswirkt. Eine Weiterentwicklung der LM-Delta-Ansätze sollte darauf abzielen, diesen Punkt zu verbessern, indem z. B. zur Prognose der Differenzen zwischen CAMS-Prognose am Stationsort und gemessener NO_2 -Konzentration auf Basis der berücksichtigten Eingangsdaten (Windrichtung, Windgeschwindigkeit, Kfz-Daten, Wochentag, Stunde des Tages) andere Methoden als eine multivariate lineare Regressionsanalyse untersucht werden, z. B. auch aus dem Bereich des Maschinellen Lernens.

Im Hinblick auf einen operationellen Einsatz der LM-Delta-Ansätze wären zudem folgende Punkte zu untersuchen:

- ▶ Die Regressionskoeffizienten, die in den Prognosegleichungen verwendet werden, müssen auf Basis bekannter, d. h. zum Prognosezeitpunkt zurückliegender Daten erstellt werden. Hier wäre zu untersuchen, auf welchem Datensatz die Regressionskoeffizienten am besten bestimmt werden bzw. in welchem Turnus die Erstellung der Regressionskoeffizienten zu wiederholen wäre. Bestimmt man beispielsweise die Regressionskoeffizienten einmal jährlich neu auf Basis der Daten vom Vorjahr? Oder bestimmt man sie täglich neu auf Basis der vergangenen k Wochen, wobei k noch bestimmt werden müsste?
- ▶ In diesem Zusammenhang müsste geprüft werden, welcher Zeit- und Rechenaufwand bzw. welche Hardware-Ressourcen mit der Erstellung der Regressionskoeffizienten für alle zu berücksichtigenden Stationen verbunden wäre.
- ▶ Hinsichtlich der Kfz-Daten wären weitere Untersuchungen erforderlich. Im vorliegenden Projekt wurde festgestellt, dass die Kfz-Zählraten für die Frankfurter Allee in Berlin auch an anderen Standorten zu besseren Prognoseergebnissen geführt haben. Es wäre zu untersuchen, ob sie dies „immer“ tun, d. h. an jeder Verkehrsstation und auch für andere Bezugsjahre. Wahrscheinlicher ist, dass die Kfz-Ganglinie der Frankfurter Allee typische Eigenschaften hat, die auch an den anderen hier betrachteten Stationsorten auftreten und deswegen dort zu einer Verbesserung der Prognosegüte führen, z. B. der Tagesgang mit einer Morgen- und einer Nachmittagsspitze.

12 Quellenverzeichnis

CAMS (2021): Regional Production, Updated documentation covering all Regional operational systems and the ENSEMBLE. Following U3 upgrade, November 2020. Copernicus Atmosphere Monitoring Service (CAMS).

CAMS (2022): The CAMS European air quality ensemble forecasts welcomes two new state-of-the-art models. <https://atmosphere.copernicus.eu/cams-european-air-quality-ensemble-forecasts-welcomes-two-new-state-art-models> (16.05.2024)

EG (1997): Entscheidung des Rates 97/101/EG vom 27. Januar 1997 zur Schaffung eines Austausches von Informationen und Daten aus den Netzen und Einzelstationen zur Messung der Luftverschmutzung in den Mitgliedstaaten. Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften Nr. L 35, S. 14. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/?uri=CELEX:31997D0101>

EU (2008): Richtlinie 2008/50/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 21. Mai 2008 über Luftqualität und saubere Luft für Europa. Amtsblatt der Europäischen Union Nr. L 152, S. 1. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/?uri=CELEX%3A32008L0050>

IVU Umwelt (2018): Sicherstellung der Ozonprognose. FKZ 3716 51 201 0. Abschlussbericht. Veröffentlichung UBA-Texte 70/2019. Im Auftrag des Umweltbundesamtes. <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/sicherstellung-der-ozonprognose>

IVU Umwelt (2023): Einfluss von Kondensaten auf die Partikelkonzentration. Abschlussbericht. FKZ 3718 51 241 0. Unter Mitarbeit von TNO, Utrecht und ANECO GmbH & Co., Mönchengladbach. Im Auftrag des Umweltbundesamtes. Abschlussbericht noch unveröffentlicht.

IVU Umwelt (laufend): Erarbeitung und Anwendung eines Verfahrens zur Abschätzung der Unsicherheit von Modellrechnungen zur Luftschadstoffausbreitung mit Fokus auf Ozon (OzonEval). FKZ 3720 51 201 0. In Zusammenarbeit mit Institut für Meteorologie an der Freien Universität Berlin, IASS Potsdam, TNO Utrecht und TROPOS Leipzig. Im Auftrag des Umweltbundesamtes. Projekt noch in Bearbeitung.

Janssen, S.; Thunis, P. (2020): FAIRMODE Guidance Document on Modelling Quality Objectives and Benchmarking. Version 3.2. EUR 30264 EN, Publications Office of the European Union, Luxembourg. doi:10.2760/30226, JRC120649

Kang, D.; Mathur, R.; Rao, S.T.; Yu, S. (2008): Bias adjustment techniques for improving ozone air quality forecasts. *Journal of Geophysical Research*, 113, D23308. doi:10.1029/2008JD010151

McKeen, S.; Wilczak, J.; Grell, G.; Djalalova, I.; Peckham, S.; Hsie, E.-Y.; Gong, W.; Bouchet, V.; Menard, S.; Moffet, R.; McHenry, J.; McQueen, J.; Tang, Y.; Carmichael, G. R.; Pagowski, M.; Chan, A.; Dye, T.; Frost, G.; Lee, P.; Mathur, R. (2005): Assessment of an ensemble of seven real-time ozone forecasts over eastern North America during the summer of 2004. *Journal of Geophysical Research*. 110, D21307. doi:10.1029/2005JD005858

Neal, L. S.; Agnew, P.; Moseley, S.; Ordóñez, C.; Savage, N.H.; Tilbee, M. (2014): Application of a statistical post-processing technique to a gridded, operational, air quality forecast. *Atmospheric Environment* 98, S. 385-393. doi:10.1016/j.atmosenv.2014.09.004

Savage, N. H.; Agnew, P.; Davis, L. S.; Ordóñez, C.; Thorpe, R.; Johnson, C. E.; O'Connor, F. M.; Dalvi, M. (2013): Air quality modelling using the Met Office Unified Model (AQUUM OS24-26): model description and initial evaluation. *Geosci. Model Dev.*, 6, S. 353–372. doi:10.5194/gmd-6-353-2013

S-VELD (2022): Sentinel-basierte Atmosphärenprodukte zur Bewertung des Einflusses von Verkehrsemissionen auf die Luftqualität in Deutschland (S-VELD). Arbeitsgemeinschaft IVU Umwelt GmbH, Freiburg; Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Oberpfaffenhofen; Freie Universität Berlin; TNO, Utrecht. Projekt im Rahmen des FuE-Förderprogramms „Modernitätssfonds“ (mFUND) des BMDV.

<https://www.tib.eu/de/suchen/id/TIBKAT:1851266216/S-VELD-Verbundprojekt-im-Rahmen-des-datenbasierten?cHash=d66d55a0df7b7ef661837f3f073cd828>

Thunis, P.; Cuvelier, C. (2020): Fairmode DELTA Version 6.0. Concepts / User's Guide / Diagrams. Joint Research Centre, Ispra. <https://aqm.jrc.ec.europa.eu/section/assessment/Document#DELTA-UserGuide> (31.08.2020)

Thunis, P.; Pederzoli, A.; Pernigotti, D. (2012): Performance criteria to evaluate air quality modeling applications. Atmospheric Environment 59 S. 476–482. doi:10.1016/j.atmosenv.2012.05.043