# Empirische Untersuchungen zur Berechnung von Frachten in Fließgewässern

Hartmut Hebbel und Detlef Steuer

## Zusammenfassung

Die Fracht $F$ ist eine integrale Größe vom Produkt aus Konzentration $C(t)$ und Abfluss $Q(t)$ an einem Querschnitt eines Fließgewässers über die Zeit $t$ aus einem vorgegebenen Zeitintervall $J$. Das Hauptziel der Untersuchungen besteht darin, geeignete Verfahren zu finden, um Frachten bei zeitdiskret ermittelten Konzentrationen und quasi-kontinuierlich beobachteten Abflussdaten möglichst genau zu bestimmen. Im wesentlichen werden dabei bezüglich der Gewinnung der Konzentrationsdaten die Mischpobenstrategie und die systematische Zeitstichprobe zugrunde gelegt.

Schwerpunktmäßig werden für die empirischen Berechnungen Jahresfrachten betrachtet (entweder für das Kalenderjahr oder das hydrologische Jahr vom 01.11. bis 31.10. des folgenden Jahres). Der einfacheren Unterteilung wegen werden exemplarisch nur Intervalle der Länge von 364 Tagen herangezogen.

## Inhalt

# 1 Definitionen und Strategien zur Frachtermittlung

Auf einem vorgegebenen Zeitintervall $J = [t_a, t_b]$ der Länge $|J| = t_b - t_a$ werden verschiedene Messgrößen $X$, $Y$ usw. betrachtet, insbesondere der Abfluss $Q$ und die Konzentration $C$ eines Wasserinhaltsstoffes an einem Fließquerschnitt. Die theoretischen Werte zu einem Zeitpunkt $t \in J$ sind dann $X(t)$, $Y(t)$ usw. Konkret ermittelte Werte zu ausgewählten Messzeitpunkten $t_i$ aus $J$ werden bezeichnet mit $X(t_i)$, $Y(t_i)$ usw. Jeder Messzeitpunkt $t_i$ ist dabei „repräsentativ" für ein geeignetes Messintervall $J_i$ aus $J$ mit $|J| = \sum_{i=1}^{n} |J_i|$. Damit kann jedem Messwert ein *Messgewicht* $g_i = \frac{|J_i|}{|J|}$ mit $\sum_{i=1}^{n} g_i = 1$ zugeordnet werden. Liegt keine genauere Information vor, wird $g_i = \frac{1}{n}$ gesetzt.

## 1.1 Theoretische und empirische Intervall-Maßzahlen

Der *theoretische bzw. empirische Intervall-Mittelwert* der Messgröße $X$ ist der theoretische bzw. empirische (arithmetische) Mittelwert im Zeitintervall $J$, gegeben durch

$$\mu_X = \frac{1}{|J|} \int_J X(t)\,dt \quad \text{bzw.} \quad \overline{X} = \sum_{i=1}^{n} g_i\, X(t_i)\,,$$

z. B. Jahresmittel, Tagesmittel, Stundenmittel, je nach Wahl von $J$.

Die *theoretische bzw. empirische Intervall-Varianz* der Messgröße $X$ ist die theoretische bzw. empirische mittlere quadratische Abweichung vom entsprechenden Intervall-Mittelwert im Zeitintervall $J$, gegeben durch

$$\sigma_X^2 = \frac{1}{|J|} \int_J \big(X(t) - \mu_X\big)^2\,dt = \frac{1}{|J|} \int_J X^2(t)\,dt - \mu_X^2$$

bzw.

$$s_X^2 = \sum_{i=1}^{n} g_i\,(X(t_i) - \overline{X})^2 = \sum_{i=1}^{n} g_i\, X^2(t_i) - \overline{X}^2\,.$$

Die *theoretische bzw. empirische Intervall-Kovarianz* der Messgrößen $X$ und $Y$ im Zeitintervall $J$ ist ein Maß für ihren theoretischen bzw. empirischen linearen Zusammenhang in $J$, d. h.

$$\sigma_{XY} = \frac{1}{|J|} \int_J \big(X(t) - \mu_X\big)\big(Y(t) - \mu_Y\big)\,dt = \frac{1}{|J|} \int_J X(t)Y(t)\,dt - \mu_X\mu_Y$$

bzw.

$$s_{XY} = \sum_{i=1}^{n} g_i\,(X(t_i) - \overline{X})(Y(t_i) - \overline{Y}) = \sum_{i=1}^{n} g_i\, X(t_i)Y(t_i) - \overline{X}\,\overline{Y}\,.$$

Die *theoretische bzw. empirische Intervall-Korrelation* der Messgrößen $X$ und $Y$ im Zeitintervall $J$ ist ein auf den Bereich $[-1, 1]$ normiertes Maß für ihren theoretischen bzw. empirischen linearen Zusammenhang in $J$, gegeben durch

$$\rho_{XY} = \frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X \sigma_Y} \quad (\sigma_X^2 \neq 0\,,\ \sigma_Y^2 \neq 0) \quad \text{bzw.} \quad r_{XY} = \frac{s_{XY}}{s_X s_Y} \quad (s_X^2 \neq 0\,,\ s_Y^2 \neq 0)\,.$$

Diese Intervall-Maßzahl gibt an, wie gut die Werte $X(t)$, $Y(t)$ bzw. $X(t_i)$, $Y(t_i)$ in $J$ auf einer Modell-Geraden liegen der Art

$$Y(t) = \mu_Y + (X(t) - \mu_X)\frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X^2} + U(t) \quad \text{bzw.} \quad Y(t_i) = \overline{Y} + (X(t_i) - \overline{X})\frac{s_{XY}}{s_X^2} + U(t_i)\,.$$

Für $\rho_{XY} = 1\,(-1)$ bzw. $r_{XY} = 1\,(-1)$ ist die Gerade positiv (negativ) geneigt und die Reste $U(t)$ bzw. $U(t_i)$ sind identisch Null. Für $\rho_{XY} = 0$ bzw. $r_{XY} = 0$, also $\sigma_{XY} = 0$ bzw. $s_{XY} = 0$ spielt der lineare Teil im Modell keine Rolle. In diesem Fall heißen $X$ und $Y$ *linear unabhängig* im Zeitintervall $J$.

Bei einer *Intervallzerlegung* von $J$ in die Teilintervalle $J_i$ mit Gewichten $g_i = \frac{|J_i|}{|J|}$, Mittelwerten $\mu_X^{(i)} = \frac{1}{|J_i|}\int_{J_i} X(t)\,dt$, $\mu_Y^{(i)} = \frac{1}{|J_i|}\int_{J_i} Y(t)\,dt$ und Kovarianzen bzw. Varianzen

$$\sigma_{XY,\text{int}}^{(i)} = \frac{1}{|J_i|}\int_{J_i}\big(X(t) - \mu_X^{(i)}\big)\big(Y(t) - \mu_Y^{(j)}\big)\,dt\,, \quad \sigma_{X,\text{int}}^{(i)2} = \sigma_{XX,\text{int}}^{(i)}\,, \quad i = 1,\ldots,n,$$

gilt

$$\mu_X = \sum_{i=1}^{n} g_i \mu_X^{(i)} \quad \text{und} \quad \sigma_{XY} = \sigma_{XY,\text{int}} + \sigma_{XY,\text{ext}}$$

mit *interner* und *externer Intervall-Kovarianz*

$$\sigma_{XY,\text{int}} = \sum_{i=1}^{n} g_i\,\sigma_{XY,\text{int}}^{(i)}\,, \quad \sigma_{XY,\text{ext}} = \sum_{k=1}^{n} g_i\,(\mu_X^{(i)} - \mu_X)(\mu_Y^{(i)} - \mu_Y)\,.$$

Für $X = Y$ ergibt sich die Zerlegungsformel für die Varianz $\sigma_X^2 = \sigma_{XX}$. Sind alle Teilintervalle gleichlang mit $|J_i| = \delta$, dann können *Kreuzkovarianzen von $X$ in $|J_i|$ und $Y$ in $|J_j|$* (bzw. für $X = Y$ *Autokovarianzen von $X$ in $J_i$ und $J_j$*) definiert werden durch

$$\begin{aligned}
\sigma_{XY,\text{int}}^{(ij)} &= \frac{1}{\delta}\int_{J_1}\big(X(t+(i-1)\delta) - \mu_X^{(i)}\big)\big(Y(t+(j-1)\delta) - \mu_Y^{(j)}\big)\,dt\,, \quad \sigma_{XY,\text{int}}^{(ii)} = \sigma_{XY,\text{int}}^{(i)} \\
\sigma_{XY}^{(ij)} &= \frac{1}{\delta}\int_{J_1}\big(X(t+(i-1)\delta) - \mu_X\big)\big(Y(t+(j-1)\delta) - \mu_Y\big)\,dt\,, \qquad \sigma_{XY}^{(ii)} = \sigma_{XY}^{(i)} \\
&= \sigma_{XY,\text{int}}^{(ij)} + (\mu_X^{(i)} - \mu_X)(\mu_Y^{(j)} - \mu_Y)\,.
\end{aligned}$$

Für die zugehörigen Matrizen $\Sigma_{XY,\text{int}} = (\sigma_{XY,\text{int}}^{(ij)})$ und $\Sigma_{XY} = (\sigma_{XY}^{(ij)})$ gilt dann bei Summation bzw. Mittelung über alle Elemente

$$\begin{aligned}
\overline{\Sigma}_{XY,\text{int}} &= \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sigma_{XY,\text{int}}^{(ij)} = \frac{1}{n}\sigma_{XY,\text{int}} + \frac{1}{n^2}\sum\sum_{i\neq j}\sigma_{XY,\text{int}}^{(ij)} \\
&= \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sigma_{XY}^{(ij)} = \frac{1}{n}\sigma_{XY} + \frac{1}{n^2}\sum\sum_{i\neq j}\sigma_{XY}^{(ij)} = \overline{\Sigma}_{XY}\,.
\end{aligned}$$

## 1.2 Abfluss, Konzentration, Transport und Fracht

Der *Abfluss (Durchfluss)* an einem Fließquerschnitt $G$ der Flächengröße $|G|$ (z.B. in m$^2$) zum Zeitpunkt $t$ ist das Wasservolumen, das sich pro Zeiteinheit durch $G$ mit der Geschwindigkeit $V$ (z.B. in m/s) bewegt, d.h.

$$Q(t) = \iint_{(x,y)\in G} V(x,y,t)\,dx\,dy \quad \text{(dann in m}^3\text{/s).}$$

Dabei bezeichnen $x$, $y$ die Koordinaten eines Punktes in $G$.

Die *Konzentration* eines Wasserinhaltsstoffes an einem Fließquerschnitt $G$ zum Zeitpunkt $t$ ist die im Fließquerschnitt $G$ mittlere Konzentration zum Zeitpunkt $t$, d.h.

$$C(t) = \frac{1}{|G|} \int\int_{(x,y)\in G} C(x,y,t)\,dx\,dy \quad \text{(z.B. in mg/l} \mathrel{\widehat{=}} \text{g/m}^3\text{)}.$$

Zur möglichst genauen empirischen Bestimmung der Konzentration $C(t)$ sind entweder viele Messungen im Querschnitt erforderlich oder es muss auf Grund der Erfahrung eine „repräsentative“ Stelle im Querschnitt ausgewählt werden. Von dieser Situation wird im folgenden stets ausgegangen.

Der *Transport* $T(t)$ zum Zeitpunkt $t$ ist die pro Zeiteinheit durch den Fließquerschnitt $G$ bewegte Masse eines Stoffes, also

$$T(t) = \int\int_{(x,y)\in G} C(x,y,t)\,V(x,y,t)\,dx\,dy \overset{(\approx)}{=} C(t)\cdot Q(t) \quad \text{(dann in g/s).}$$

Das zweite Gleichheitszeichen gilt genau genommen nur dann, wenn $C$ und $V$ im Fließquerschnitt zum Zeitpunkt $t$ unkorreliert sind, also wenn

$$\sigma_{CV}(t) = \frac{1}{|G|} \int\int_{(x,y)\in G} C(x,y,t)\,V(x,y,t)\,dx\,dy - C(t)\,V(t) = 0 \quad \text{mit} \quad V(t) = \frac{1}{|G|} Q(t)\,.$$

Die *Fracht* $F$ im Zeitintervall $J$ der Länge $|J|$ (z.B. in s) ist die die dieser Zeitspanne insgesamt durch den Fließquerschnitt $G$ bewegte Masse eines Stoffes, also

$$F = |J|\mu_T = \int_J T(t)\,dt \overset{(\approx)}{=} \int_J C(t)Q(t)\,dt \quad \text{(dann in g).}$$

Das letzte Gleichheitszeichen gilt genau genommen nur dann, wenn $C$ und $V$ im Fließquerschnitt, über die Zeit gesehen, unkorreliert sind, also wenn $\int_J \sigma_{CV}(t)\,dt = 0$ gilt.

Die hier so genannte *Mischprobenfracht* $M$ im Zeitintervall $J$ der Länge $|J|$ (z.B. in s) ist das auf $J$ hochgerechnete Produkt der Intervall-Mittelwerte $\mu_C$ und $\mu_Q$, also

$$M = |J|\mu_C\mu_Q \quad \text{(dann in g).}$$

Der Name *Mischprobenfracht* ist deshalb gewählt, weil im Prinzip der Intervall-Mittelwert $\mu_C$ über eine kontinuierliche zeitproportionale Mischprobe gewonnen werden kann, wenn der Stoff „probenstabil“ ist und keine Konservierungsprobleme auftreten. Bei „quasi-kontinuierlich“ erfasstem Abfluss lässt sich auch $\mu_Q$ sehr genau berechnen, so dass $M$ in diesem Fall leicht und fast fehlerfrei ermittelt werden kann.

Für das weitere Verständnis ist es wichtig und interessant zu wissen, wann die Fracht $F$ und die leichter zu ermittelnde Mischprobenfracht $M$ übereinstimmen. Diese Frage wird im Anschluss an die Abb. 1 beantwortet, die die Definitionen von Fracht $F$ und Mischprobenfracht $M$ als Fläche unter der $\mu_C\mu_Q$-Linie veranschaulicht. Im allgemeinen ist $F$ von $M$ verschieden, wie die Grafik zeigt.

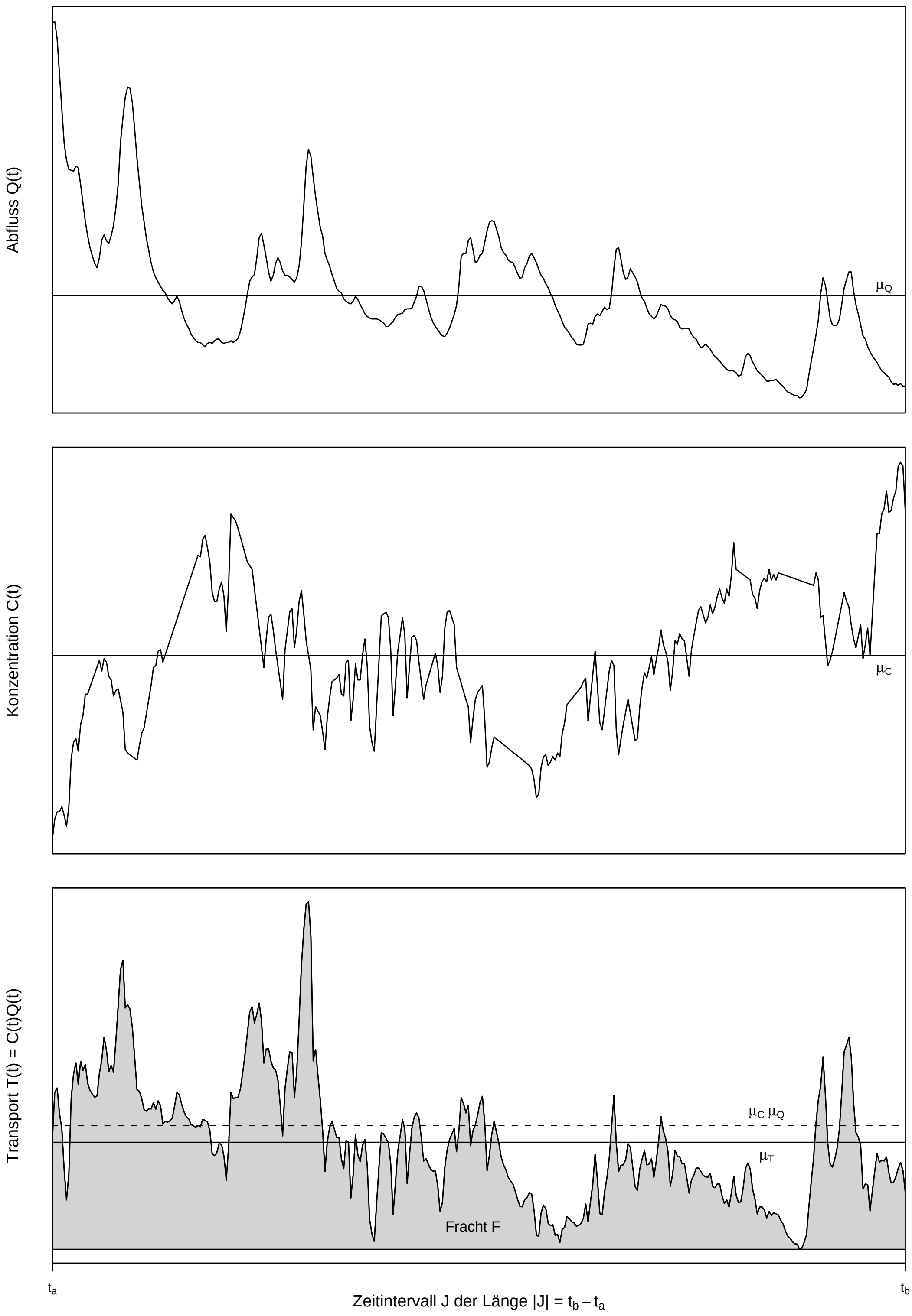



Abb. 1: Ganglinien von Abfluss $Q$, Konzentration $C$ und Transport $T = CQ$ sowie die Fracht $F$ als Fläche unter der $T$-Ganglinie bzw. $\mu_T$-Linie und Mischprobenfracht $M$.

Fundamental für die weiteren Untersuchungen ist der Zusammenhang der Fracht $F$ und der Mischprobenfracht $M$. Nach Definition der Intervall-Kovarianz $\sigma_{CQ}$ ergibt sich unmittelbar die folgende Aussage:

**1.1 Satz** Für die Fracht $F$ und die Mischprobenfracht $M$ gilt der Zusammenhang

$$F = M + |J|\sigma_{CQ} \quad \text{mit} \quad \sigma_{CQ} = \frac{1}{|J|}\int_J \big(C(t) - \mu_C\big)\big(Q(t) - \mu_Q\big)\,dt$$
$$= \frac{1}{|J|}\int_J C(t)Q(t)\,dt - \mu_C\mu_Q\,. \qquad \square$$

Da $\sigma_{CQ}$ ein Maß für die Stärke des *linearen* Zusammenhangs von $C$ und $Q$ im Intervall $J$ ist, stimmen $F$ und $M$ genau dann überein, wenn dort überhaupt kein linearer Zusammenhang zwischen $C$ und $Q$ besteht ($\sigma_{CQ} = 0$), also wenn $C$ und $Q$ *linear unabhängig* sind. Andere rein nichtlineare Zusammenhänge von $C$ und $Q$ stören die Gleichheit von $F$ und $M$ nicht.

Abb. 2 zeigt verschiedene Zusammenhangsdiagramme von $C$ und $Q$ im Zeitintervall $J = [t_a, t_b]$ unterschiedlich starker positiver (obere Bilder), negativer (mittlere Bilder) und rein nichtlinearer (untere Bilder) Zusammenhänge. Dargestellt sind jeweils die Wege, die die Punktepaare $(Q(t), C(t))$ von $t_a$ bis $t_b$ im $Q$-$C$-Koordinatensystem zurücklegen.

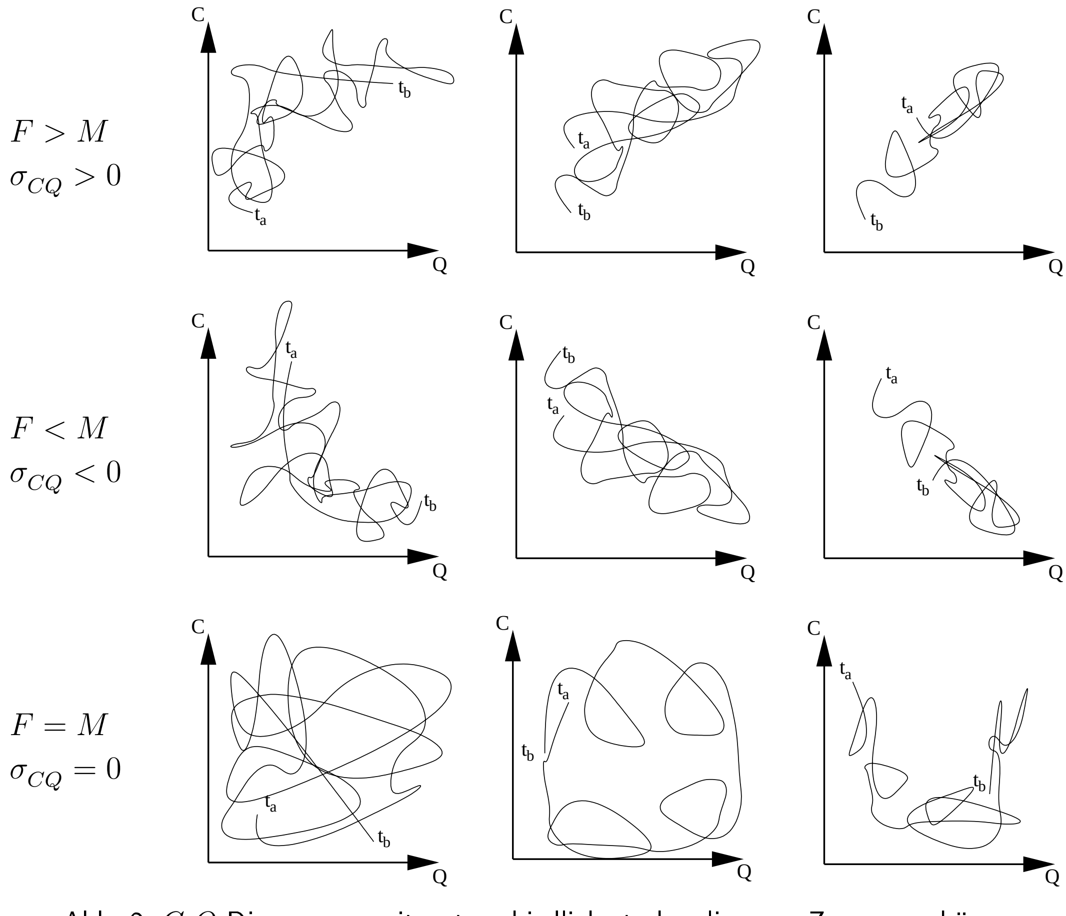



Abb. 2: $C$-$Q$-Diagramme mit unterschiedlich starken linearen Zusammenhängen

Da es in der Regel praktisch nicht möglich ist, die Messgrößen $C$ und $Q$ kontinuierlich in der Zeit $t$ zu erfassen, sind zur empirischen Bestimmung der Fracht $F$ Approximationen erforderlich. Im wesentlichen gibt es zwei grundsätzlich unterschiedliche Strategien, die *Mischprobenstrategie*, die zwar lüchenlose, jedoch gemittelte Konzentrationswerte liefert, und die *Stichprobenstrategie*, die nur zu lückenhaften, dafür aber originären Konzentrationswerten führt. Beide Strategien werden nachfolgend näher erläutert.

## 1.3 Mischprobenstrategie

Das Gesamtintervall $J$ wird in Teilintervalle $J_i$ mit $i = 1, \ldots, n$ eingeteilt, die so genannten *Messintervalle*, üblicherweise gleich groß gewählt. In den Messintervallen wird dem Fließgewässer jeweils eine (zeitproportionale) Mischprobe entnommen, d. h. in kleinen zeitlichen äquidistanten Abständen über $J_i$ werden Wasserproben gleichen Volumens entnommen und zu einer gemeinsamen Probe vereinigt. Dieses Vorgehen heißt *Mischprobenstrategie*. Als Resultat ergibt sich, von den chemisch-analytischen Problemen abgesehen, jeweils der Intervall-Mittelwert $C_i = \mu_C^{(i)}$ in $J_i$. Voraussetzung ist, dass die Abflussdaten $Q(t)$ „quasi-kontinuierlich" vorliegen bzw. jeweils der Intervall-Mittelwert $Q_i = \mu_Q^{(i)}$ in $J_i$ bekannt ist. Damit kann in $J_i$ die Mischfracht $M_i = |J_i| C_i Q_i$ berechnet werden, siehe Abb. 3.

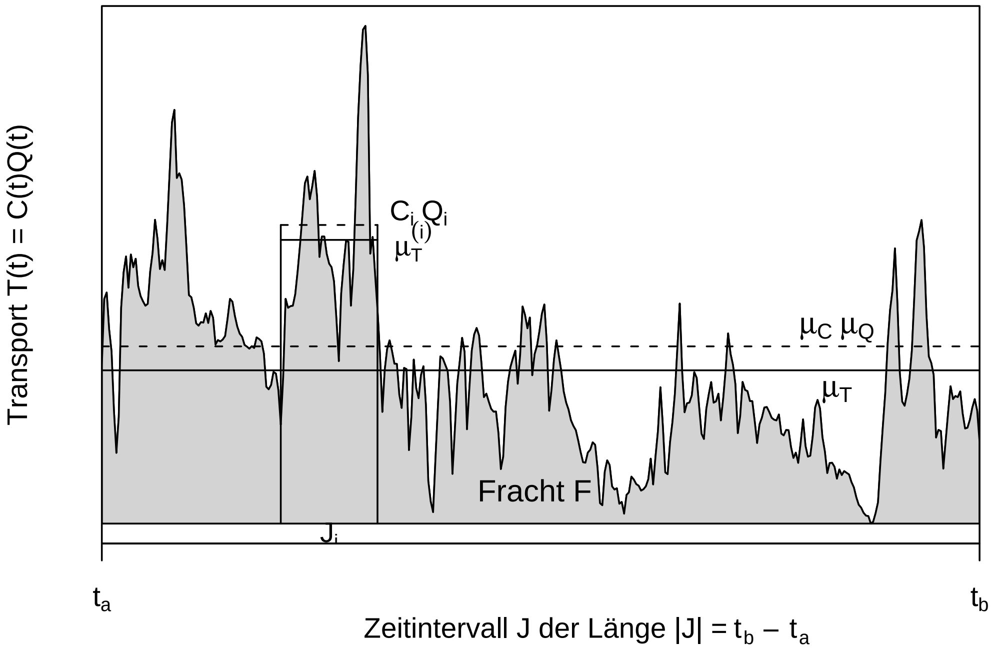



Abb. 3: Frachtberechnung aus Teilfrachten $F_i = |J_i| \mu_T^{(i)}$ bzw. Mischprobenfrachten $M_i = |J_i| C_i Q_i$ in $J_i$ für $i = 1, \ldots, n$

Der Wert

$$F_M = \sum_{i=1}^{n} M_i \quad \text{mit} \quad M_i = |J_i| C_i Q_i\,, \;\; C_i = \mu_C^{(i)}, \;\; Q_i = \mu_Q^{(i)}, \;\; i = 1, \ldots, n$$

heißt *Frachtschätzung nach der Mischprobenstrategie*. Er stimmt aber nicht mit der eigentlich gesuchten Fracht $F$ überein. Aufgrund der Gleichung $F_i = M_i + |J_i| \sigma_{CQ,\mathsf{int}}^{(i)}$ nach Satz 1.1 mit der Fracht $F_i$, der Mischfracht $M_i$ und der Intervall-Kovarianz $\sigma_{CQ,\mathsf{int}}^{(i)}$ in $J_i$ sowie $F = \sum_{i=1}^{n} F_i$ ergibt sich:

**1.2 Satz** Für die Fracht $F$ und die Frachtschätzung $F_M$ gilt der Zusammenhang

$$F = F_M + |J| \sigma_{CQ,\mathsf{int}} \quad \text{mit} \quad \sigma_{CQ,\mathsf{int}} = \frac{1}{|J|} \sum_{i=1}^{n} |J_i| \sigma_{CQ,\mathsf{int}}^{(i)}. \qquad \square$$

Aus der Zerlegungsformel $\sigma_{CQ} = \sigma_{CQ,\mathsf{int}} + \sigma_{CQ,\mathsf{ext}}$ der Kovarianz (vgl. Abschnitt 1.2) folgt:

**1.3 Korollar** Für die Fracht $F$, die Frachtschätzung $F_M$ und die Mischprobenfracht $M$ in einem Zeitintervall $J$ gilt der Zusammenhang

$$F = F_M + |J|\sigma_{CQ,\mathsf{int}} \quad \text{und} \quad F_M = M + |J|\sigma_{CQ,\mathsf{ext}} \,. \qquad \square$$

Die Frachtschätzung $F_M$ stimmt also mit der Fracht $F$ bereits genau dann überein, wenn die interne Intervall-Kovarianz $\sigma_{CQ,\mathsf{int}}$ gleich Null ist, also wenn sich im Mittel die einzelnen Messintervall-Kovarianzen $\sigma_{CQ}^{(i)}$ aufheben. Die üblicherweise auftretenden Relationen sind

$$F > F_M \quad \text{und} \quad F_M > M \quad \text{für} \quad \sigma_{CQ,\mathsf{int}} > 0\,,\ \ \sigma_{CQ,\mathsf{ext}} > 0 \quad (\text{also } \sigma_{CQ} > 0)\,,$$

$$F < F_M \quad \text{und} \quad F_M < M \quad \text{für} \quad \sigma_{CQ,\mathsf{int}} < 0\,,\ \ \sigma_{CQ,\mathsf{ext}} < 0 \quad (\text{also } \sigma_{CQ} < 0)\,.$$

Unterschiedliche Relationen wie $F > F_M$, $F_M < M$ oder $F < F_M$, $F_M > M$ sind zwar möglich, treten jedoch in der Praxis seltener auf.

## 1.4 Stichprobenstrategie

Werden zu einzelnen ausgewählten Zeitpunkten $t_i$ aus $J_i$ für $i = 1, \ldots, n$ Wasserproben entnommen und analysiert, dann liegt eine *Stichprobenstrategie* vor. Stammen die Zeitpunkte $t_i$ aus geeignet festgelegten Messintervallen $J_i$, die eine Zerlegung von $J$ darstellen, so dass $F_i = \int_{J_i} C(t)Q(t)\,dt \approx |J_i|C(t_i)Q(t_i)$, $i = 1, \ldots, n$, gilt, dann ist die Frachtschätzung durch

$$F_S = |J|\overline{T} \quad \text{mit} \quad \overline{T} = \sum_{i=1}^{n} g_i\, C(t_i)Q(t_i)\,,\ \ g_i = \frac{|J_i|}{|J|}\,,\ \ i = 1, \ldots, n$$

recht genau für die Fracht $F = \sum_{i=1}^{n} F_i$, vgl. Abb. 4.

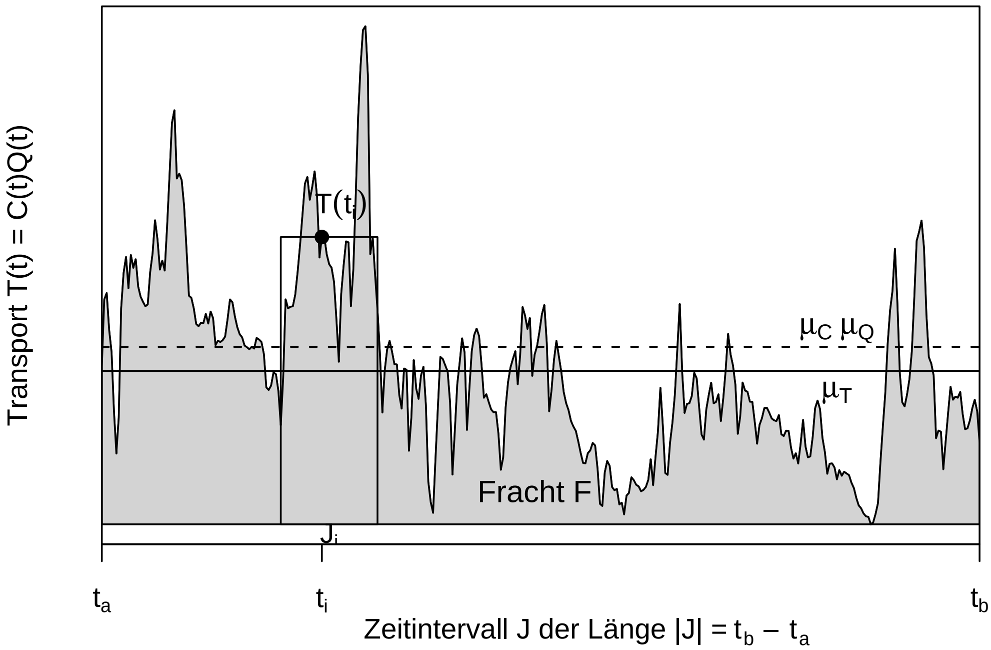



Abb. 4: Frachtberechnung aus Stichprobenwerten $T(t_i) = C(t_i)Q(t_i)$ und ihren Teilhochrechnungen $|J_i|T(t_i)$ für die Teilfracht $F_i$, $i = 1, \ldots, n$

Um jedoch $F_i \approx |J_i| C(t_i) Q(t_i)$ zu erreichen, insbesondere bei größeren Teilintervallen, müssten im Prinzip Konzentration und Abfluss ständig beobachtet werden. Rein theoretisch existiert (mindestens) ein Zeitpunkt $t_i$ aus $J_i$, so dass $F_i = |J_i| C(t_i) Q(t_i)$ gilt (Mittelwertsatz der Integralrechnung). Die praktische Umsetzung einer derartigen so genannten *bewussten Auswahl* wäre sehr personal- und zeitaufwändig sowie stoffabhängig. Daher wird die bewusste Auswahl im allgemeinen nicht realisierbar sein und hier nicht weiter verfolgt. Außerdem ließe sich der Fehler nicht abschätzen.

Realistisch gesehen, sind die Beobachtungs-Zeitpunkte mehr oder weniger zufällig festgelegt. Sind sie nach einer *rein zufälligen Zeit-Stichprobe* ausgewählt, dann gilt $\mathsf{E}(F_S) = F$ und $\mathsf{Var}(F_S) = |J|^2 \frac{1}{n} \sigma_T^2$. Je „dynamischer“ die Transportganglinie ist, desto ungenauer ist die Schätzung. Deshalb ist es sinnvoll, vorab eine Einteilung in Messintervalle (genannt *Schichten*) $J_i,\ i = 1, \ldots, m$, so vorzunehmen, dass innerhalb eines Teilintervalls die Transportganglinie möglichst wenig schwankt. Dann werden unabhängig in jedem Teilintervall jeweils $n_i$ Zeitpunkte mit $\sum_{i=1}^m n_i = n$ rein zufällig für die Probennahmen bestimmt. Der Schätzer $F_S$ ist dann nach wie vor erwartungstreu und nunmehr ist $\mathsf{Var}(F_S) = \sum_{i=1}^m |J_i|^2 \frac{1}{n_i} \sigma_{T,\mathsf{int}}^{(i)2}$, siehe beispielsweise *Hebbel (2000)* oder *Hebbel, Steuer (2001)*. Für kleine Teilintervall-Varianzen $\sigma_{T,\mathsf{int}}^{(i)2}$ wird die Schätzunsicherheit gegenüber der reinen Zufallsauswahl verringert. Aber auch diese *geschichtete Zeit-Stichprobe* ist stoffabhängig und damit schwierig, in die Praxis umzusetzen.

Von besonderem Interesse ist hier die bevorzugt verwendete *systematische Zeit-Stichprobe*, bei der jeweils nur ein Zeitpunkt $t_i$ aus gleich langen Messintervallen $J_i$ ausgewählt wird und zwar stets im gleichen Abstand $\delta = |J_i|$, d.h. $t_i = t_1 + (i-1)\delta$ für $i = 1, \ldots, n$. Zufällig ist dabei also nur der erste Zeitpunkt $t_1$ aus $J_1$.

Der auf das Gesamtintervall $J$ hochgerechnete empirische Intervall-Mittelwert des Transports, also

$$F_S = |J| \overline{T} \quad \text{mit} \quad \overline{T} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} T(t_i)\,, \;\; T(t_i) = C(t_i) Q(t_i)\,, \;\; i = 1, \ldots, n$$

heißt *Frachtschätzung aufgrund einer systematischen Zeit-Stichprobe*. Da $t_1$ aus $J_1$ rein zufällig gewählt wird, ist $F_S$ eine Zufallsvariable. Für ihren Erwartungswert und ihre Varianz gilt, vgl. Korollar 3.3 aus *Hebbel (2006)*:

**1.4 Satz** Für die Frachtschätzung

$$F_S = |J| \sum_{i=1}^{n} g_i \, C(t_i) Q(t_i) \quad \text{mit} \quad g_i = \frac{1}{n}$$

aufgrund einer systematischen Zeit-Stichprobe $(t_1, \ldots, t_n)$ aus dem Gesamtintervall $J$ gilt

$$\mathsf{E}(F_S) = F \quad \text{und} \quad \mathsf{Var}(F_S) = |J|^2 \overline{\Sigma}_{TT,\mathsf{int}} = |J|^2 \overline{\Sigma}_{TT}\,.$$

□

Um die Varianz, die näherungsweise der einer geschichteten Zeit-Stichprobe mit $n_i = 1$ entspricht, zu reduzieren, muss offenbar in Zeitintervallen höherer Dynamik von Konzentration bzw. Abfluss dichter als in Bereichen geringerer Dynamik beprobt werden. Eine Verdopplung des Stichprobenumfangs halbiert in etwa die Varianz, wenn sich die Teilintervall-Kovarianzen gegeneinander im wesentlichen aufheben.

Durch eine geeignete Wahl der Gewichte $g_i$ kann der Schätzer verbessert werden. Dazu ist jedoch die Kenntnis aller zweiten Intervall-Momente $\sigma_{TT}^{(ij)}$ der Matrix $\Sigma_{TT}$ erforderlich. Nach *Hebbel (2006)* gilt dann

**1.5 Satz** Der beste lineare Schätzer $F_S^{(g)}$ für $F$ (im Sinne des kleinsten mittleren quadratischen Fehlers, siehe Abschnitt 1.5) der Form

$$F_S^{(g)} = |J|\widehat{\boldsymbol{a}}'\boldsymbol{T} = |J|\big(\overline{T} + \big(\widehat{\boldsymbol{a}} - \tfrac{1}{n}\mathbf{1}\big)'\boldsymbol{T}\big) \quad \text{mit} \quad \widehat{\boldsymbol{a}}'\mathbf{1} = 1\,, \quad \boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} T(t_1) \\ \vdots \\ T(t_n) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

ist gegeben durch

$$\widehat{\boldsymbol{a}}' = (\mathbf{1}'\Sigma_{TT}^{-1}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}'\Sigma_{TT}^{-1}, \quad \text{also} \quad F_S^{(g)} = |J|(\mathbf{1}'\Sigma_{TT}^{-1}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}'\Sigma_{TT}^{-1}\boldsymbol{T}\,.$$

□

Eine Schätzung von $\Sigma_{TT}$ mit $\frac{1}{2}n(n+1)$ Werten aufgrund der $n$ Werte $T(t_1), \ldots, T(t_n)$ ist nicht möglich. Dazu wären weitere Annahmen erforderlich, z. B. „Intervall-Kovarianzstationarität“, d.h. die Intervall-Autokovarianzen $\sigma_{TT}^{(ij)}$ sind nur abhängig vom Abstand $|i-j|$, was im allgemeinen nicht gerechtfertigt ist. Wird hingegen der Abfluss $Q$ „quasi-kontinuierlich“ beobachtet, dann gibt es zahlreiche weitere Möglichkeiten, die Fracht $F$ zu schätzen bzw. den diskreten Frachtschätzer $F_S$ zu „korrigieren“, siehe dazu Abschnitt 3.

## 1.5 Vergleichskriterium für Frachtschätzer

Zum statistischen Vergleich verschiedener Schätzer $\widehat{F}$ für die Fracht $F$ wird der *mittlere quadratische Fehler (mean square error)*

$$\mathsf{MSE}(\widehat{F}, F) = \mathsf{E}\big((\widehat{F} - F)^2\big) = \mathsf{Var}(\widehat{F}) + \big(\mathsf{E}(\widehat{F}) - F\big)^2$$

herangezogen. Er setzt sich additiv zusammen aus der Varianz von $\widehat{F}$ und dem Quadrat der Verzerrung von $\widehat{F}$, die gegeben ist durch $\mathsf{E}(\widehat{F}) - F$.

Speziell für den nicht zufälligen, jedoch verzerrten Schätzer $F_M$ nach der Mischprobenstrategie und dem zufälligen, aber unverzerrten Schätzer $F_S$ nach der (systematischen) Stichprobenstratege sowie dem besten linearen Schätzer $F_S^{(g)}$ gilt damit nach Sätzen 1.2, 1.4 und 1.5:

**1.6 Korollar** Für die mittleren quadratischen Fehler von $F_M$, $F_S$ und $F_S^{(g)}$ gelten

$$\begin{aligned}
\mathsf{MSE}(F_M, F) &= (F_M - F)^2 = |J|^2\sigma_{CQ,\mathsf{int}}^2 \\
\mathsf{MSE}(\,F_S\,, F) &= |J|^2\overline{\Sigma}_{TT,\mathsf{int}} = |J|^2\overline{\Sigma}_{TT}\,, \;\; \overline{\Sigma}_{TT} \approx \mu_C^2\overline{\Sigma}_{QQ} + 2\mu_C\mu_Q\overline{\Sigma}_{CQ} + \mu_Q^2\overline{\Sigma}_{CC} \\
\mathsf{MSE}(F_S^{(g)}, F) &= |J|^2(\mathbf{1}'\Sigma_{TT}^{-1}\mathbf{1})^{-1}
\end{aligned}$$

und im Vergleich von $F_S$ mit $F_S^{(g)}$ ist

$$\begin{aligned}
\mathsf{MSE}(F_S, F) - \mathsf{MSE}(F_S^{(g)}, F) &= |J|^2\big(\tfrac{1}{n^2}\mathbf{1}'\Sigma_{TT}\mathbf{1} - (\mathbf{1}'\Sigma_{TT}^{-1}\mathbf{1})^{-1}\big) \\
&= \big(\widehat{\boldsymbol{a}} - \tfrac{1}{n}\mathbf{1}\big)'\Sigma_{TT}\big(\widehat{\boldsymbol{a}} - \tfrac{1}{n}\mathbf{1}\big) \geq 0\,.
\end{aligned}$$

□

Zu Demonstrationszwecken wird später in den Beispielrechnungen 2.2.3 der Schätzer $F_S^{(g)}$ mit angegeben. Damit soll gezeigt werden, wie groß die Verbesserung gegenüber $F_S$ wäre, wenn die individuellen Intervall-Autokovarianzen bekannt wären.

Eine generelle Aussage, ob der Schätzer $F_M$ oder $F_S$ also eine der beiden bevorzugt verwendeten Beprobungsstrategien stets besser ist, kann aus Korollar 1.6 nicht abgeleitet werden. Je geringer dem Betrage nach die interne Kovarianz $\sigma_{CQ,\text{int}}$ von $C$ und $Q$ ist, desto genauer ist die Schätzung $F_M$ für $F$. Für Messintervalle mit näherungsweise konstanten Transporten $T$ (also inversen $C$ und $Q$) entstehen im Mittel kaum Autokovarianzen, so dass dann der Schätzer $F_S$ für $F$ sehr präzise ist.

Im Abschnitt 2 werden die Situationen herausgestellt, die in diesem Sinne sehr gute Frachtbestimmungen zulassen. Der Abschnitt 3 untersucht, wie der Schätzer $F_S$ nach der Stichprobenstrategie verbessert werden kann, wenn der Abfluss $Q$ quasi-kontinuierlich und nicht nur diskret vorliegt. Diese Betrachtungen basieren ganz überwiegend auf Transport- bzw. Konzentrationsmodellen.

**Bemerkung** (1) Zur Minderung des Matrix-Inversionsproblems kann mit den „normierten" Werten

$$\widetilde{T}(t) = \frac{T(t)}{\mu_T} \text{ bzw. } \widetilde{\sigma}_{TT}^{(ij)} = \frac{\sigma_{TT}^{(ij)}}{\theta^{(i)}\theta^{(j)}}\,, \widetilde{\Sigma}_{TT} = \left(\widetilde{\sigma}_{TT}^{(ij)}\right),$$

mit $\theta^{(i)} = \mu_T^{(i)}$ oder $\theta^{(i)} = \sigma_T^{(i)}$ gerechnet werden. Dann ist

$$\begin{aligned} F_S^{(g)} &= |J|\mu_T(\mathbf{1}'\Sigma_{\widetilde{T}\widetilde{T}}^{-1}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}'\Sigma_{\widetilde{T}\widetilde{T}}^{-1}\widetilde{\boldsymbol{T}} \quad \text{bzw.} \\ F_S^{(g)} &= |J|\left((\tfrac{1}{\theta^{(1)}}\dots\tfrac{1}{\theta^{(n)}})\widetilde{\Sigma}_{TT}^{-1}(\tfrac{1}{\theta^{(1)}}\dots\tfrac{1}{\theta^{(n)}})'\right)^{-1}(\tfrac{1}{\theta^{(1)}}\dots\tfrac{1}{\theta^{(n)}})\Sigma_{\widetilde{T}\widetilde{T}}^{-1}(\tfrac{T(t_1)}{\theta^{(1)}}\dots\tfrac{T(t_n)}{\theta^{(n)}})' \end{aligned}$$

(2) Aus $\sum_{n=0}^{\infty} B^n = (\mathrm{I}-B)^{-1}$ für $B^n \to 0$ in einer geeigneten Matrixnorm ergibt sich für $B = \mathrm{I} - \alpha A$ mit positiv definiter symmetrischer Matrix $A$ und maximalem Eigenwert $\lambda$

$$A^{-1} = \alpha\sum_{n=0}^{\infty}(\mathrm{I}-\alpha A)^n \quad \text{für} \quad \alpha < \frac{1}{\lambda}\,.$$

# 2 Frachtberechnung aus quasi-kontinuierlichen Daten

Erhobene Daten werden als *quasi-kontinuierlich* angesehen, wenn die Messintervalle $J_i$ für $i = 1, \ldots, n$ im Gesamtintervall $J$ bei der Misch- oder Stichprobenstrategie *genügend klein* sind in dem Sinne, dass die Frachtschätzung nahezu exakt für die Fracht $F$ ist. Die folgenden Betrachtungen beziehen sich auf die Berechnung von *Jahresfrachten* in Fließgewässern, d. h. $J$ hat die Länge eines Jahres. Der besseren Unterteilbarkeit wegen ist hier $|J| = 364\,\mathrm{d}$ mit der Einheit Tag d. Für die Umrechnung in die Einheit Sekunde s gilt

$$|J| = 364\,\mathrm{d} \quad \text{mit} \quad \mathrm{d} = 24 \cdot 60 \cdot 60\,\mathrm{s} = 24 \cdot 3600\,\mathrm{s} = 86\,400\,\mathrm{s}.$$

Anderen Situationen sind die Ergebnisse entsprechend anzupassen. Diskutiert wird, unter welchen Voraussetzungen der mittlere quadratische Fehler vernachlässigbar ist, so dass $F_M$ bzw. $F_S$ sehr gut die Fracht schätzen und wann das nicht der Fall ist.

## 2.1 Stundenintervalle

Bei der Berechnung von Jahresfrachten können Konzentration $C$ und Abfluss $Q$ innerhalb einer Stunde $J_i$ als konstant angesehen werden. Deshalb gilt dort $\sigma_{CQ}^{(i)} = 0$ und damit $\sigma_{CQ,\mathrm{int}} = 0$, also nach Korollar 1.3

$$F = F_M = \sum_{i=1}^{n} |J_i| C_i Q_i \quad \text{mit} \quad |J_i| = 3600\text{ s},\ n = 24 \cdot 364 = 8736.$$

Dabei bezeichnen $C_i$ und $Q_i$ die (konstanten) Stundenwerte von Konzentration und Abfluss. Misch- und Stichprobenstratagie liefern dann dieselben Werte $C_i = C(t_i)$ und $Q_i = Q(t_i)$ und insofern stimmen die Beprobungen überein.

## 2.2 Tagesintervalle

Im Verlauf eines Tages $J_i$ von Konzentration $C$ und Abfluss $Q$ kann bei der Frachtberechnung nicht mehr von konstanten Werten ausgegangen werden. Vielmehr muss mit größerer Dynamik und bei bestimmten Stoffen mit typischen periodischen Tagesschwankungen gerechnet werden, siehe auch *Symader (1988)* und *Symader, Strunk (1991)*. Nach Satz 1.2 und Korollar 1.3 gilt dann

$$F = F_M + |J| \sigma_{CQ,\mathrm{int}} \quad \text{mit} \quad F_M = \sum_{i=1}^{n} |J_i| C_i Q_i\,, \;\; |J| \sigma_{CQ,\mathrm{int}} = \sum_{i=1}^{n} |J_i| \sigma_{CQ,\mathrm{int}}^{(i)}\,,$$
$$|J_i| = 24 \cdot 3600\,\mathrm{s} = 86\,400\,\mathrm{s} \quad \text{und} \quad n = 364.$$

Damit ist $F = F_M$ genau dann, wenn $\sigma_{CQ,\mathrm{int}} = 0$ gilt. In welcher Situation dies zutrifft, wird für zwei typische Fälle untersucht:

- Die Tagesverläufe von $C - C_i$ und $Q - Q_i$ sind zentrierte Potenzfunktionen der Zeit.
- Die Tagesverläufe von $C - C_i$ und $Q - Q_i$ sind eine gerade und eine ungerade Funktion.

### 2.2.1 Tagesverläufe als Potenzfunktionen der Zeit

Für die zentrierten Potenzfunktionen

$$C(t) - C_i = b_{Ci}\big(t - t_0 - \tfrac{1}{2}|J_i|\big)^{p_i} \quad \text{und} \quad Q(t) - Q_i = b_{Qi}\big(t - t_0 - \tfrac{1}{2}|J_i|\big)^{q_i}$$

gilt

$$\begin{aligned}
|J_i|\sigma^{(i)}_{CQ,\mathsf{int}} &= \int_{J_i}\big(C(t) - C_i\big)\big(Q(t) - Q_i\big)\,dt = \int_{t_0}^{t_0+|J_i|} b_{Ci}b_{Qi}\big(t - t_0 - \tfrac{1}{2}|J_i|\big)^{p_i+q_i}dt \\
&= \frac{1}{p_i+q_i+1} b_{Ci}b_{Qi}\left[\big(t - t_0 - \tfrac{1}{2}|J_i|\big)^{p_i+q_i+1}\right]_{t_0}^{t_0+|J_i|} \\
&= \frac{1}{p_i+q_i+1} b_{Ci}b_{Qi}\big((\tfrac{1}{2}|J_i|)^{p_i+q_i+1} - (-\tfrac{1}{2}|J_i|)^{p_i+q_i+1}\big)
\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned}
|J|\sigma_{CQ,\mathsf{int}} &= \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{p_i+q_i+1} b_{Ci}b_{Qi}\big((\tfrac{1}{2}|J_i|)^{p_i+q_i+1} - (-\tfrac{1}{2}|J_i|)^{p_i+q_i+1}\big) \\
&= \frac{1}{12}\sum_{i=1}^{n} b_{Ci}b_{Qi}|J_i|^3 \quad \text{speziell für} \quad p_i = q_i = 1\,, \;\; i = 1, \ldots, n\,.
\end{aligned}$$

Die interne Kovarianz hängt damit nur von den Koeffizienten der Potenzfunktionen in den Tagen ab. Bei ungeraden $p_i + q_i$ entfallen sogar der Summanden. Ist bei geraden $p_i + q_i$ (entweder geraden oder ungeraden $p_i$, $q_i$) über einen längeren Zeitraum $J$ in den Messgrößen insgesamt kein positiver oder negativer Trend vorhanden, dann heben sich die individuellen Koeffizienten der Tage auf, da positiven Werten $b_{Ci}$, $b_{Qi}$ entsprechend negative gegenüber stehen müssen. Folglich kann auch für diesen Fall die Fracht $F$ fast fehlerfrei durch $F_M$ geschätzt werden.

Werden an einem Tag Einzelproben $C(t_i)$ und $Q(t_i)$ erhoben, dann ist darauf zu achten, dass sie möglichst „repräsentativ“ für den jeweiligen Tag im Sinne des Mittelwertes sind. Insbesondere sollte also nicht bei extremen Situationen untersucht werden. Zumindest die Uhrzeiten der Beprobungen, d. h. die Routenplanungen sollten von Tag zu Tag wechseln.

### 2.2.2 Tagesverläufe als eine gerade und eine ungerade Funktion

Eine Funktion $X$ auf $J_i = [t_0, t_0+|J_i|]$ heißt *gerade oder achsensymmetrisch* bzw. *ungerade oder punktsymmetrisch zur Intervallmitte* $t_0 + \frac{1}{2}|J_i|$, wenn gilt

$$X(t) = X(2t_0 + |J_i| - t) \quad \text{bzw.} \quad X(t) = -X(2t_0 + |J_i| - t)\,, \quad t \in [t_0, t_0 + |J_i|]\,.$$

Stellen die Tagesverläufe von $C - C_i$, $Q - Q_i$ eine gerade und eine ungerade Funktion dar, dann ist ihr Produkt ungerade und folglich gilt

$$|J_i|\sigma^{(i)}_{CQ,\mathsf{int}} = \int_{J_i}\big(C(t) - C_i\big)\big(Q(t) - Q_i\big)\,dt = 0 \;\text{ sowie }\; |J|\sigma_{CQ,\mathsf{int}} = \sum_{i=1}^{n} |J_i|\sigma^{(i)}_{CQ,\mathsf{int}} = 0\,.$$

Ein praxisrelevantes Beispiel ist ein trigonometrisch-periodischer Tagesgang der Konzentration (gerade) und ein linearer Verlauf des Abflusses (ungerade), also

$$C(t) - C_i = a_i \cos \frac{2\pi}{|J_i|}(t - t_0) \quad \text{und} \quad Q(t) - Q_i = b_i\big(t - t_0 - \frac{1}{2}|J_i|\big)\,.$$

In dieser Situation stimmt die Frachtschätzung $F_M$ nach der Mischprobenstrategie mit der gesuchten Fracht $F$ überein. Wird die Konzentration über eine Einzelprobe (und nicht über eine Tagesmischprobe) gewonnen, ist wie zuvor darauf zu achten, dass nicht in extremen Situationen, sondern bei mittleren Verhältnissen untersucht wird.

### 2.2.3 Beispielrechnungen

An einem Flussquerschnitt liegen über einen Zeitraum $J$ von (fast) einem Jahr (mit $n = 364$ Tagen) stündliche Messungen (Stundenmittelwerte) vor und zwar von

- Abfluss $Q$ in m$^3$/s
- Konzentrationen $C1$ bis $C7$ in mg/l,

deren Herkunft und inhaltliche Bedeutung nicht mehr zu klären ist. Dennoch ist das Datenmaterial für die rein rechentechnische Aussage, in wie weit die quasi-kontinuierliche Fracht, berechnet aus den Stundenmittelwerten, „richtig“ aus den Tagesmittelwerten bestimmt werden kann, durchaus nützlich.

#### Datenaufbereitung und -darstellung

Im Anhang A1 sind zunächst die Datenreihen $Q$ und $C1$ bis $C7$ grafisch dargestellt, siehe Grafiken 1.0 bis 1.7. Die Originaldaten (unruhige Kurve) der stündlichen Messungen (Stundenmittelwerte) sind jeweils zusammen in einer Grafik mit den Tagesmittelwerten dargestellt. Der Einfachheit halber wurden fehlende Werte linear interpoliert (trotz der damit verbundenen Problematiken) und diese Bereiche gekennzeichnet. Im „Großen“ werden die Ganglinien durch die Tagesmittelwerte sehr gut erfasst. Im „Kleinen“ hingegen, also über den Tag gesehen, werden die kurzfristigen Bewegungen „herausgefiltert“. Bei einigen Stoffen ist sehr deutlich eine indivduelle Tagesdynamik zu erkennen.

#### Frachtberechnungsvergleiche

Aus den (quasi-kontinuierlichen) Stundenmittelwerten, bezeichnet mit $C(k)$ (in g/m$^3$), $Q(k)$ (in m$^3$/s), und den Stunden(mischproben)frachten 0,0036 $C(k)Q(k)$ (in $10^6$g) werden einerseits die Tagesfrachten $F_i$ für einen Tag $J_i$ mit $|J_i| = 24 \cdot 3600\,\text{s} = 86400\,\text{s} = 0{,}0864 \cdot 10^6\,\text{s}$, $i = 1, \ldots, n = 364$, bestimmt durch

$$F_i = 0{,}0036 \sum_{k \in J_i} C(k)Q(k) = 0{,}0864\, \mu_T^{(i)} \quad \text{mit} \quad \mu_T^{(i)} = \frac{1}{24} \sum_{k \in J_i} C(k)Q(k)\,.$$

Andererseits werden die Tagesmischprobenfrachten $M_i$ berechnet nach

$$M_i = 0,0864\, C_i Q_i \quad \text{mit den Tagesmittelwerten} \quad C_i = \frac{1}{24}\sum_{k\in J_i} C(k)\,, \quad Q_i = \frac{1}{24}\sum_{k\in J_i} Q(k)\,.$$

Nach Satz 1.1 gilt der Zusammenhang

$$F_i = M_i + |J_i|\sigma^{(i)}_{CQ,\mathsf{int}} \quad \text{mit} \quad \sigma^{(i)}_{CQ,\mathsf{int}} = \frac{1}{24}\sum_{k\in J_i}(C(k)-C_i)(Q(k)-Q_i)\,.$$

Die Grafiken 2.1 bis 2.7 im Anhang A1 enthalten jeweils auf einem Blatt die Ganglinien der Tagesfrachten $F_i$ (oben) und der Tagesmischprobenfrachten $M_i$ (unten) für die Stoffe $C1$ bis $C7$. In nur wenigen Fällen ist an einigen Maximalstellen überhaupt ein kleiner Unterschied zu erkennen. In der Gesamtsumme heben sich diese leichten Unterschiede fast vollständig auf, wie die nachfolgende Tabelle mit den Werten $F = \sum_{i=1}^{364} F_i \overset{(\approx)}{=} \sum_{i=1}^{364} M_i = F_M$ ausweist:

Tab. 1: Vergleich von Jahresfrachten $F$ mit den Schätzungen $F_M$, basierend auf Tagesmischproben

| Fracht | $C1$ | $C2$ | $C3$ | $C4$ | $C5$ | $C6$ | $C7$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $F$ | 102 607,4 | 33 342,03 | 2894,705 | 30 635,54 | 26 198,20 | 175,6450 | 13 453,13 |
| $F_M$ | 102 683,4 | 33 349,74 | 2895,058 | 30 465,46 | 26 199,21 | 175,0000 | 13 449,32 |
| $F_M - F$ | 76,0 | 7,71 | 0,353 | −170,08 | 1,01 | −0,6450 | −3,81 |
| in ‰ | 0,74 | 0,23 | 0,12 | 5,55 | 0,04 | 3,67 | 0,28 |

### 2.2.4 Zusammenfassung der Ergebnisse

Für die Frachtschätzung über einen längeren Zeitraum (etwa mehreren Monaten) können Tages(mittel)werte von Konzentration und Abfluss verwendet werden. Der Fehler liegt im allgemeinen im Promillebereich.

## 2.3 Mehrwöchentliche Intervalleinteilung

Bei einer gröberen, ggf. ungleichen Jahresintervalleinteilung gilt wiederum nach dem fundamentalen Zusammenhang von Fracht und Mischprobenfracht (Satz 1.1) in einem Teilintervall $J_i$ der Länge $|J_i|$

$$F_i = M_i + |J_i|\sigma^{(i)}_{CQ,\mathsf{int}} \quad \text{mit} \quad M_i = |J_i| C_i Q_i\,, \;\; \sigma^{(i)}_{CQ,\mathsf{int}} = \frac{1}{|J_i|}\int_{J_i}\big(C(t)-C_i\big)\big(Q(t)-Q_i\big)\,dt$$

und den Teilintervallmittelwerten $C_i$, $Q_i$ für $i = 1\ldots,n$. Die Summation über $i$ ergibt dann die Gleichung (Satz 1.2)

$$F = F_M + |J|\sigma_{CQ,\mathsf{int}} \quad \text{mit} \quad F = \sum_{i=1}^{n} F_i\,, \;\; F_M = \sum_{i=1}^{n} M_i\,, \;\; |J|\sigma_{CQ,\mathsf{int}} = \sum_{i=1}^{n} |J_i|\sigma^{(i)}_{CQ,\mathsf{int}}\,.$$

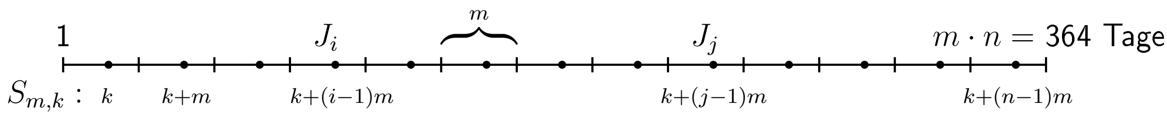
Nunmehr kann im allgemeinen nicht mehr davon ausgegangen werden, dass die individuellen Kovarianzen $\sigma_{CQ,\text{int}}^{(i)}$ verschwinden bzw. $F_i$ und $M_i$ übereinstimmen. Auch in der Summe werden sich die individuellen Kovarianzen nicht mehr aufheben, so dass mit einer größeren Verzerrung von $F_M$ bezüglich $F$ gerechnet werden muss.

Als Alternative bietet sich der unverzerrte Stichprobenschätzer $F_S$ aus Abschnitt 1.4 an, der jedoch eine möglicherweise nicht unerhebliche Varianz aufweist:

$$F_S = |J|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} C(t_i)Q(t_i) \quad \text{mit} \quad \mathsf{E}(F_S) = F\,, \;\; \mathsf{Var}(F_S) = |J|^2\overline{\Sigma}_{TT,\text{int}} = |J|^2\overline{\Sigma}_{TT}\,.$$

### 2.3.1 Beispielrechnungen

Um einen Eindruck über die Größenordnungen der Fehler zu erhalten, wird das Datenmaterial aus Abschnitt 2.2.3 in Form der Tagesmittelwerte $C_t$, $Q_t$, $t = 1,\ldots,364$ verwendet. Das Gesamtintervall $J$ der Länge $|J| = 364$ Tage wird praxisnah eingeteilt in $n = 13$, 26 bzw. 52 Teilintervalle $J_i$ der Länge $|J_i| = m$ mit $m = 28$, 14 bzw. 7 Tage ($m \cdot m = 364$):




In Tab. 2 sind die zugehörigen Zeitstichprobenpäne (S28, S14, S7) der systematischen Auswahl der Beobachtungszeitpunkte und ihre (gleichwahrscheinlichen) Realisierungen aufgelistet.

Tab. 2: Zeitstichprobenpläne S28, S14 und S7

| $k$ | | $k+28(i-1)$, $i=1,\ldots,13$ | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | $J_1$ | $J_2$ | $\ldots$ | $J_{13}$ |
| 1 | $S_{28,1}$ | 1 | 29 | $\ldots$ | 337 |
| 2 | $S_{28,2}$ | 2 | 30 | $\ldots$ | 338 |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | | $\vdots$ |
| 28 | $S_{28,28}$ | 28 | 56 | $\ldots$ | 364 |

| $k$ | | $k+14(i-1)$, $i=1,\ldots,26$ | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | $J_1$ | $J_2$ | $\ldots$ | $J_{26}$ |
| 1 | $S_{14,1}$ | 1 | 15 | $\ldots$ | 351 |
| 2 | $S_{14,2}$ | 2 | 16 | $\ldots$ | 352 |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | | $\vdots$ |
| 14 | $S_{14,14}$ | 14 | 28 | $\ldots$ | 364 |

| $k$ | | $k+7(i-1)$, $i=1,\ldots,52$ | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | $J_1$ | $J_2$ | $\ldots$ | $J_{52}$ |
| 1 | $S_{7,1}$ | 1 | 8 | $\ldots$ | 358 |
| 2 | $S_{7,2}$ | 2 | 9 | $\ldots$ | 359 |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | | $\vdots$ |
| 7 | $S_{7,7}$ | 7 | 14 | $\ldots$ | 364 |

In allen drei Varianten werden jeweils die Frachtschätzung $F_M$ nach der Mischprobenstrategie (M28, M14, M7), die (globale) Mischfracht $M = |J|\mu_C\mu_Q$ und alle 28, 14 bzw. 7 Realisierungen des Frachtschätzers $F_S$ sowie ggf. $F_S^{(g)}$ nach der systematischen Zeitstichprobe (S28, S14, S7) berechnet und mit der Fracht $F$ verglichen.

Die Ergebnisse für die Stoffe $C1$ bis $C7$ sind in den Grafiken 3, 4 und 5 im Anhang A2 visuell angegeben. Die Fracht $F$ wird dabei (approximativ) aus den vorliegenden Tagesmittelwerten $C_t$, $Q_t$, $t = 1,\ldots,364$ (1 d = 86400 s, 1000 kg = $10^6$ g) berechnet (und entspricht $F_M$ aus Tab. 1), d.h.

$$F = 0{,}0864\cdot 364\,\mu_T \overset{(\approx)}{=} 0{,}0864\sum_{t=1}^{364} C_t\,Q_t \;\text{ in } 1000\,\text{kg} \quad \text{mit} \quad \mu_T \overset{(\approx)}{=} \frac{1}{364}\sum_{t=1}^{364} T_t\,, \;\; T_t = C_t\,Q_t\,.$$

Für die Mischfracht gilt

$$M = 0{,}0864 \cdot 364\, \mu_C \mu_Q \text{ in } 1000\,\text{kg} \quad \text{mit} \quad \mu_C \overset{(\approx)}{=} \frac{1}{364} \sum_{t=1}^{364} C_t\,, \;\; \mu_Q \overset{(\approx)}{=} \frac{1}{364} \sum_{t=1}^{364} Q_t\,.$$

Die Frachtschätzung $F_{Mm}$ (Mittel über je $m$ aufeinander folgende Werte) ist gegeben durch

$$F_{Mm} = 0{,}0864\, m \sum_{i=1}^{n} \mu_C^{(i)} \mu_Q^{(i)} \text{ in } 1000\,\text{kg} \quad \text{mit} \quad \mu_C^{(i)} \overset{(\approx)}{=} \frac{1}{m} \sum_{t \in J_i} C_t\,, \;\; \mu_Q^{(i)} \overset{(\approx)}{=} \frac{1}{m} \sum_{t \in J_i} Q_t\,.$$

Die $m$ verschiedenen Stichprobenwerte (Zeitpunkte jeweils im Abstand $m$)

$$F_{Sm}(k) = 0{,}0864 \cdot 364\, \overline{T}(k) \quad \text{in } 1000\,\text{kg} \qquad \text{mit} \quad \overline{T}(k) = \frac{1}{n} \sum_{t \in S_{m,k}} C_t\, Q_t\,, \;\; k = 1, \ldots, m$$

des Frachtschätzers $F_{Sm}$ treten jeweils mit Wahrscheinlichkeit $1/m$ auf und schwanken erwartungstreu um ihren Mittelwert $F$ (was auch in den Bildern klar erkennbar ist):

$$\mathsf{E}(F_{Sm}) \overset{(\approx)}{=} \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} F_{Sm}(k) = 0{,}0864 \cdot 364 \underbrace{\frac{1}{m}\frac{1}{n} \sum_{t \in S_{m,k}} C_t\, Q_t}_{\mu_T} = F$$

sowie

$$\mathsf{MSE}(F_{Sm}, F) = \mathsf{Var}(F_{Sm}) \overset{(\approx)}{=} \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} \big(F_{Sm}(k) - F\big)^2 = 0{,}0864^2 m\, n^2 \sum_{k=1}^{m} \big(\overline{T}(k) - \mu_T\big)^2$$

in Übereinstimmung mit Satz 1.4.[1]

Die numerischen Werte von $F$, $F_{Mm}$ und $M$ für die Stoffe $C1$ bis $C7$ sind in Tab. 3 angegeben. Außerdem ist zum Vergleich jeweils der mittlere quadratische Fehler von $F_{Mm}$ und $F_{Sm}$ bezüglich $F$, also $\mathsf{MSE}(F_{Mm}, F) = (F_{Mm} - F)^2$ (Korollar 1.6) und $\mathsf{MSE}(F_{Sm}, F) = \mathsf{Var}(F_{Sm}) \overset{(\approx)}{=} \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} (F_{Sm}(k) - F)^2$ berechnet.

Zusätzlich ist für $m = 28$ der theoretisch beste lineare Schätzer $F_{Sm}^{(g)}$ nach Satz 1.5 mit den Werten

$$F_{Sm}^{(g)}(k) = 0{,}0864 \cdot 364\, \widehat{a}' T(k)\,, \quad \widehat{a}' = (\mathbf{1}'\Sigma_{TT}^{-1}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}'\Sigma_{TT}^{-1}, \quad T(k) = \begin{pmatrix} T_{k+(1-1)m} \\ \vdots \\ T_{k+(n-1)m} \end{pmatrix}$$

eingetragen sowie

$$\mathsf{MSE}(F_{Sm}^{(g)}, F) = \mathsf{E}\big((F_{Sm}^{(g)} - F)^2\big) \overset{(\approx)}{=} \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} \big(F_{Sm}^{(g)}(k) - F\big)^2 \le \mathsf{MSE}(F_{Sm}, F)\,.^{2}$$

---

[1] $$\begin{aligned} \mathsf{MSE}(F_{Sm}, F) &= \mathsf{Var}(F_{Sm}) = |J|^2 \tfrac{1}{n^2} \mathbf{1}'\Sigma_{TT}\mathbf{1}\,, \quad \Sigma_{TT} = \big(\sigma_{TT}^{(ij)}\big)_{ij} \\ &= 0{,}0864^2 m^2 \textstyle\sum_i \sum_j \sigma_{TT}^{(ij)}, \quad \sigma_{TT}^{(ij)} \overset{(\approx)}{=} \frac{1}{m} \sum_k (T_{k+(i-1)m} - \mu_T)(T_{k+(j-1)m} - \mu_T) \\ &\overset{(\approx)}{=} 0{,}0864^2 m \textstyle\sum_i \sum_j \sum_k (T_{k+(i-1)m} - \mu_T)(T_{k+(j-1)m} - \mu_T) \\ &= 0{,}0864^2 m\, n^2 \textstyle\sum_{k=1}^{m} (\overline{T}(k) - \mu_T)^2 = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} (F_{Sm}(k) - F)^2 \end{aligned}$$

[2] $$\begin{aligned} \mathsf{MSE}(F_{Sm}^{(g)}, F) &= \frac{1}{m} \textstyle\sum_{k=1}^{m} \big(F_{Sm}^{(g)}(k) - F\big)^2 = 0{,}0864^2 m\, n^2 \sum_{k=1}^{n} \big(\widehat{a}'T(k) - \widehat{a}'\mathbf{1}\mu_T\big)^2 \\ &= 0{,}0864^2 m\, n^2 \widehat{a}' \textstyle\sum_{k=1}^{n} \big(T(k) - \mathbf{1}\mu_T\big)\big(T(k) - \mathbf{1}\mu_T\big)'\widehat{a} \\ &= 0{,}0864^2 m^2 n^2 \widehat{a}'\Sigma_{TT}\widehat{a} = 0{,}0864^2 m^2 n^2 (\mathbf{1}'\Sigma_{TT}^{-1}\mathbf{1})^{-1} \text{ in Übereinstimmung mit Satz 1.5} \end{aligned}$$

Tab. 3: Frachtschätzer $F_{Mm}$ und $F_{Sm}$ für C1 bis C7 sowie MSE's

| Fracht | $\frac{C1}{1000}$ | $\frac{C2}{1000}$ | $C3$ | $\frac{C4}{1000}$ | $\frac{C5}{1000}$ | $C6$ | $\frac{C7}{1000}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $F$ | 102,683 | 33,350 | 2 895 | 30,465 | 26,199 | 175,000 | 13,449 |
| $F_{M28}$ | 111,737 | 33,261 | 2 923 | 22,734 | 28,411 | 207,719 | 13,370 |
| $F_{M14}$ | 106,826 | 33,415 | 2 900 | 25,001 | 27,280 | 179,722 | 13,310 |
| $F_{M7}$ | 104,957 | 33,395 | 2 888 | 26,824 | 26,511 | 178,029 | 13,392 |
| $M$ | 120,338 | 30,696 | 3 690 | 19,416 | 51,292 | 148,718 | 14,486 |
| MSE$(F_{M28}, F)$ | 81 967 | 7,814 | 772 | 59 775 | 4 891 | 1071 | 6,266 |
| MSE$(F_{M14}, F)$ | 17 159 | 4,281 | 27 | 29 856 | 1 167 | 22 | 19,445 |
| MSE$(F_{M7}, F)$ | 5 171 | 2,069 | 0,049 | 13 262 | 97 | 9 | 3,269 |
| MSE$(F_{S28}, F)$ | 461 961 | 125 318 | 440 294 | 468 913 | 21 405 | 7 962 | 15 396 |
| MSE$(F_{S14}, F)$ | 55 163 | 18 302 | 97 927 | 182 751 | 5 656 | 3 021 | 1 693 |
| MSE$(F_{S7}, F)$ | 7 575 | 2 136 | 25 950 | 138 947 | 3 138 | 500 | 262 |
| MSE$(F_{S28}^{(g)}, F)$ | 79 720 | 9 608 | 65 461 | 68 259 | 3 501 | 2 234 | 1 326 |

### 2.3.2 Zusammenfassung der Ergebnisse

Aus der Definition von $\overline{\Sigma}_{TT} = \overline{\Sigma}_{TT,\text{int}}$ (Abschnitt 1.1) und mit MSE$(F_S, F) = |J|^2\overline{\Sigma}_{TT,\text{int}}$ folgt, dass sich bei einer Verdoppelung des Stichprobenumfangs $n$ der MSE halbieren würde, wenn sich die Transport-Kovarianzen in den Teilintervallen $J_i$ und $J_j$ insgesamt aufheben würden, was aber hier offenbar nicht der Fall ist. Überwiegend ist die Verbesserung sogar größer.

Nach der Theorie ist ebenfalls klar, dass ein Stichprobenschätzer $F_S$ nur dann mit dem Mischprobenschätzer $F_M$ in der Güte vergleichbar ist, wenn zwischen $C$ und $Q$ ein größerer mittlerer linearer Zusammenhang besteht, also wenn die Abweichung $|F_M - F|$ verhältnismäßig groß ist, vgl. $C1$ und $C4$ in den Grafiken 3 bis 5 im Anhang A2.

Der theoretisch beste lineare Frachtschätzer $F_S^{(g)}$ statt $F_S$ zeigt im Fall von $m = 28$ eine deutliche Verbesserung. Die Kovarianzen in $\Sigma_{TT}$ müssen jedoch bekannt sein, was praktisch nicht der Fall ist, außer bei Modellen mit kontinuierlich beobachtbaren Einflussgrößen.

# 3 Frachtschätzungen bei Vorinformation

Das Problem der Berechnung von Frachten, wenn zwar die Konzentrationswerte $C$ nur aufgrund einer systematischen Zeitstichprobe $(t_1, \ldots, t_n)$ diskret, aber andere, mit der Konzentration zusammenhängende Größen wie beispielsweise der Abluss $Q$ (quasi-)kontinuierlich vorliegen, wurde in der Literatur zahlreich an Beispielen diskutiert, siehe etwa *Fehr (2000)*, *Gölz, Schmidt (2003)*, *Heininger, Schild (2000)*, *Hilden (2003)*, *Richards (1998)* und die dort angegebene Literatur sowie *Schreiber, Krauß-Kalweit (1999)*. Eine theoretische mathematisch-statistische Untersuchung dieser Problematik in Verbindung mit empirischen Ergebnissen ist kaum zu finden. Dies soll hier unter Verwendung der Resultate aus *Hebbel (2006)* erfolgen.

Eine Frachtschätzung nach $F_S = |J| \sum_{i=1}^{n} g_i \, C(t_i) Q(t_i)$ (mit $g_i = \frac{1}{n}$) nutzt nicht die Kenntnis aller (quasi-)kontinuierlich beobachteten Messgrößen, die auf $C$ einen Einfluss haben. Bei Berücksichtigung dieser Vorinformation müssten bessere Schätzer möglich sein. Unterschieden werden hier *nicht-modellbasierte* und *modellbasierte* Frachtschätzer, die in den nachfolgenden Abschnitten getrennt behandelt werden.

## 3.1 Nicht-modellbasierte Frachtschätzer

Als nicht-modellbasiert gelten hier die in Tab. 4 aufgeführen Frachtschätzer, die unter Nutzung kontinuierlicher Abflusswerte $Q(t)$ als eine Modifikation des Schätzers

$$F_S = |J|\overline{T} \quad \text{mit} \quad \overline{T} = \sum_{i=1}^{n} g_i \, C(t_i) Q(t_i) \,, \quad g_i = \frac{|J_i|}{|J|} \, (= \frac{1}{n})$$

nach der Stichprobenstrategie angesehen werden können.

Tab. 4: Nicht-modellbasierte Frachtschätzer $\widehat{F}$ bei kontinuierlichem Abfluss

| Nr. | Frachtschätzer $\widehat{F}^{(\cdot)}$ |
|---|---|
| 1 | $\lvert J\rvert \, (\overline{C}\mu_Q + s_{CQ}) = F_S - \lvert J\rvert \, \overline{C}(\overline{Q} - \mu_Q) \,, \;\; s_{CQ}$ empirische Kovarianz von $C$,$Q$ |
| 2 | $\lvert J\rvert \sum_{i=1}^{n} g_i \, C(t_i) Q_i \,, \;\; Q_i$ theoretisches Mittel in $J_i$ |
| 3 | $\lvert J\rvert \, \overline{C} \, \mu_Q$ |
| 4 | $\lvert J\rvert \, \mu_{\widehat{T}} \,, \;\; \widehat{T}(t) = \widehat{C}(t) Q(t) \,, \;\; \widehat{C}(t)$: lineare Interpolation der $C(t_i)$-Werte |

**Schätzer 1** Der Frachtschätzer

$$\begin{aligned} \widehat{F}^{(1)} = |J| \, (\overline{C} \, \mu_Q + s_{CQ}) &= F_S - |J| \, \overline{C}(\overline{Q} - \mu_Q) \\ &= F_S - |J| \, \mu_C(\overline{Q} - \mu_Q) F_S - |J|(\overline{C} - \mu_C)(\overline{Q} - \mu_Q) \end{aligned}$$

entsteht aus $F_S = |J|\overline{T}$, indem in der Darstellung $\overline{T} = \overline{C} \, \overline{Q} + s_{CQ}$ (vgl. Abschnitt 1.1) $\overline{Q}$ durch $\mu_Q$ ersetzt wird. In der rechts stehenden Umformung ist zu erkennen, dass der Schätzer $F_S$ dann korrigiert wird, wenn die Stichprobe den Mittelwert $\mu_Q$ von $Q$ nicht richtig erfasst. Für $\overline{Q} < \mu_Q$ erfolgt eine Korrektur nach oben, bei $\overline{Q} > \mu_Q$ nach unten.

Mit $F_S - F = |J|(\overline{T} - \mu_T))$ gilt (vgl. auch *Hebbel (2006)*, siehe dort Korollare 4.5 und 3.3)

$$\mathsf{MSE}(\widehat{F}^{(1)}, F) - \mathsf{MSE}(F_S, F) \approx |J|^2\big( - 2\mu_C \overline{\Sigma}_{TQ} + \mu_C^2 \overline{\Sigma}_{QQ}\big)\,.$$

Damit ist im MSE-Vergleich $\widehat{F}^{(1)}$ im allgemeinen besser als $F_S$ zur Schätzung von $F$, wenn

$$\overline{\Sigma}_{QQ} < 2\frac{\overline{\Sigma}_{TQ}}{\mu_C}\,.$$

Diese Ungleichung ist für große positive $\overline{\Sigma}_{TQ} \approx \mu_Q \overline{\Sigma}_{CQ} + \mu_C \overline{\Sigma}_{QQ}$ bzw. insbesondere für große positive $\overline{\Sigma}_{CQ}$ erfüllt, vgl. dazu Korollar 3.3 in *Hebbel (2006)*. Unter diesen Voraussetzungen sind auch die obigen Fälle der Korrekturen sinnvoll zu erklären.

**Schätzer 2** Der Frachtschätzer

$$\widehat{F}^{(2)} = |J| \sum_{i=1}^{n} g_i\, C(t_i) Q_i$$

ergibt sich aus $F_S$, wenn statt der Einzelwerte $Q(t_i)$ aus $J_i$ die theoretischen Mittelwerte $Q_i = \mu_Q^{(i)}$ verwendet werden. Da nach Satz 1.3 in *Hebbel (2006)* $\mathsf{E}(C(t_i)) = \mu_C^{(i)} = C_i$ ist, gilt

$$\mathsf{E}(\widehat{F}^{(2)}) = |J| \sum_{i=1}^{n} g_i\, C_i Q_i = F_M = F - |J| \sigma_{CQ,\mathsf{int}}\,.$$

Damit ist $\widehat{F}^{(2)}$ zwar erwartungstreu für $F_M$, jedoch verzerrt für die eigentlich gesuchte Fracht $F$. Statistisch gesehen ist dieser Schätzer für die Fracht $F$ folglich stets schlechter als $F_M$ (im MSE-Vergleich), weil zu dem Quadrat der Verzerrung noch $\mathsf{Var}(\widehat{F}^{(2)})$ hinzukommt. Daher wird $\widehat{F}^{(2)}$ nicht in die empirischen Untersuchungen einbezogen.

**Schätzer 3** Für den Frachtschätzer

$$\widehat{F}^{(3)} = |J|\, \overline{C} \mu_Q$$

gilt

$$\mathsf{E}(\widehat{F}^{(3)}) = |J| \mu_C \mu_Q = M = F - |J| \sigma_{CQ} \quad \text{und} \quad \mathsf{Var}(\widehat{F}^{(3)}) = |J|^2 \mu_Q^2 \overline{\Sigma}_{CC}\,.$$

Die Varianz liegt in der gleichen Größenordnung wie die von $\widehat{F}^{(2)}$. Der Schätzer ist erwartungstreu für $M$, aber verzerrt für $F$, beachte Satz 1.2 und $\sigma_{CQ} = \sigma_{CQ,\mathsf{int}} + \sigma_{CQ,\mathsf{ext}}$. Haben $\sigma_{CQ,\mathsf{int}}$ und $\sigma_{CQ,\mathsf{ext}}$ gleiche Vorzeichen, dann ist das Verzerrungsquadrat noch größer als das von $\widehat{F}^{(2)}$. Daher wird auch dieser Schätzer nicht weiter berücksichtigt.

**Schätzer 4** Die lineare Interpolationsmethode bezüglich der $C(t_i)$-Werte zur Frachtberechnung liefert den Schätzer

$$\widehat{F}^{(4)} = \int_J \widehat{C}(t) Q(t)\, dt \overset{(\approx)}{=} \sum_{i=1}^{n} \int_{J_i} \widehat{C}(t) Q(t)\, dt$$

mit

$$\widehat{C}(t) = C(t_i) + b_i(t - t_i)\,, \quad t \in [t_i, t_{i+1}]\,, \quad b_i = \frac{C(t_{i+1}) - C(t_i)}{t_{i+1} - t_i}\,, \quad i = 1, \ldots, n$$

und $t_{n+1}$ bzw. $C(t_{n+1})$ ist geeignet gewählt (Extrapolation), vgl. Abb. 5.

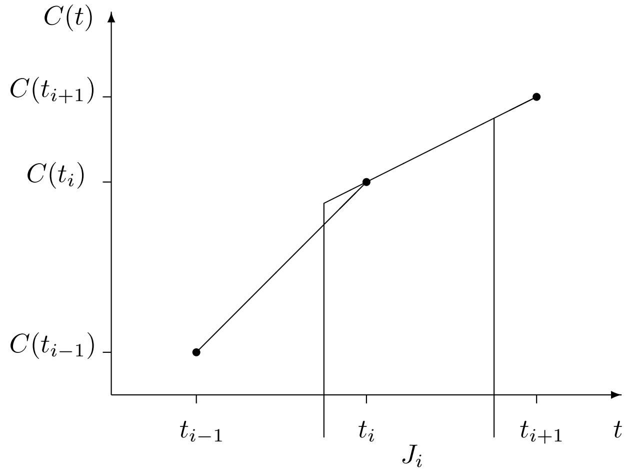



Abb. 5: Lineare Interpolation

Eingesetzt und ausintegriert ergibt sich

$$\widehat{F}^{(4)} = \sum_{i=1}^{n} |J_i| C(t_i) Q_i + \sum_{i=1}^{n} b_i |J_i| \sigma_{tQ}^{(i)} \approx \widehat{F}^{(2)} \quad \text{mit} \quad \sigma_{tQ}^{(i)} = \frac{1}{|J_i|} \int_{J_i} (t - t_i) Q(t)\, dt\,.$$

Hierbei ist $\sigma_{tQ}^{(i)}$ (in etwa) die Kovarianz von $t$ und $Q$ in $J_i$, also ein Maß für ihren linearen Zusammenhang. Da aber $Q$ im allgemeinen keinen linearen Trend in $J_i$ aufweist bzw. sich die linearen Trends im (gewichteten) Mittel aufheben, ist der zweite Summand annähernd Null, so dass die lineare Interpolationsmethode mit der $\widehat{F}^{(2)}$-Schätzung äquivalent ist. Da $F_M$ besser als $\widehat{F}^{(2)}$ ist, wird auch $\widehat{F}^{(4)}$ nicht in die empirischen Untersuchungen aufgenommen.

**Zusammenfassung** Der Schätzer 2 ist statistisch stets schlechter als $F_M$. Der Schätzer 3 ist in der Regel schlechter als Schätzer 2 und damit schlechter als $F_M$. Der Schätzer 4 ist vergleichbar mit Schätzer 2 und damit ebenfalls schlechter als $F_M$.

## 3.2 Modellbasierte Frachtschätzer

Ein weit verbreiteter Ansatz besteht darin, Modelle für die Konzentration bzw. den Transport zu entwickeln, deren Einflussgrößen sämtlich (quasi-)kontinuierlich vorliegen. Diese Modelle lassen sich dann aufgrund der gemeinsamen Beobachtungen schätzen. Mit den so geschätzten Modellen können die „fehlenden" Konzentrations- bzw. Transportwerte ermittelt werden. Aus diesen nun „vollständigen" Datensätzen kann die Fracht wie gewohnt (quasi-)kontinuierlich berechnet werden. Bei dieser zunächst naheliegenden Vorgehensweise treten aber methodische Probleme auf, die im folgenden näher untersucht werden.

Aufgrund sachlogischer Überlegungen und verfügbarer Datenbasis wird ein Modell für die Konzentration $C$ entworfen:

$$C(t) = f\big(X_1(t), \ldots, X_p(t)\big) + U(t)\,, \quad t \in J \qquad \textit{Zustandsgleichung}.$$

Die Einflussgrößen $X_1, \ldots, X_p$ müssen (quasi-)kontinuierlich beobachtbar sein, beispielsweise

Abfluss(-Transformationen) $\quad Q(t),\ Q^2(t), \ldots, \frac{1}{Q(t)},\ \frac{1}{Q^2(t)}, \ldots, \mathrm{e}^{Q(t)},\ \ln Q(t)\,,$
Wassertemperatur $WT(t)$, Leitfähigkeit $LF(t)$,
polynomieller Zeit-Trend $\quad 1,\ t\ \ldots\,,$
periodische Zeit-Komponente mit (Kreis-)Frequenzen $\lambda_j \quad \sin \lambda_j t\,,\ \cos \lambda_j t\,,$

usw. und $U$ ist eine unbeobachtbare Restkomponente. Auf der Basis von

$$\begin{aligned} C(t_1) &= f\big(X_1(t_1), \ldots, X_p(t_1)\big) + U(t_1) \\ &\ \vdots \\ C(t_n) &= f\big(X_1(t_n), \ldots, X_p(t_n)\big) + U(t_n) \end{aligned} \qquad \textit{Beobachtungsgleichungen}$$

wird die Funktion $f$ aus einer geeignet gewählten Klasse geschätzt, z. B. über das Kleinst-Quadrate-Kriterium $\min_f \sum_{i=1}^n U^2(t_i)$. Diese Schätzung sei mit $\widehat{f}$ bezeichnet. Dann wird die Fracht ermittelt durch

$$\widehat{F} = \int_J \widehat{\mu}_C(t) Q(t)\, dt \quad \text{mit} \quad \widehat{\mu}_C(t) = \widehat{f}\big(X_1(t), \ldots, X_p(t)\big)\,, \quad t \in J\,.$$

Üblich ist in diesem Zusammenhang die Verwendung reiner $C$-$Q$-Modelle wie beispielsweise

$$f(Q(t)) = \alpha + \beta \mathrm{e}^{\gamma Q(t)} \ \text{ bzw. } \ f(Q(t)) = \alpha + \beta Q^\gamma(t) \ \text{ oder } \ f(Q(t)) = \alpha + \frac{\beta}{(Q(t) - Q_0)^\gamma}$$

bzw. eine Kombination beider Ansätze, um sowohl einen Anstiegs- als auch Verdünnungseffekt in $C$ bei wachsendem $Q$ zu beschreiben, siehe etwa *Steinebach (1994)*, *Keller, Hilden, Joost (1997)* und *Brunswig (2000)*. Weist $C(t)$ in $J$ einen periodischen Verlauf auf, dann könnte die Hinzunahme der trigonometrischen Schwingungen $\sin \lambda t$, $\cos \lambda t$ mit $\lambda = \frac{2\pi}{|J|}$ und ggf. einiger Oberwellen nützlich sein, vgl. beispielsweise *Uhlig, Kuhbier (2001)*. Wird durch den Stoff $C$ im wesentlichen die Leitfähigkeit $LF$ induziert, die (quasi-)kontinuierlich beobachtet wird, dann es es sinnvoll, $LF$ als eine Einflussgröße im Modell zu berücksichtigen.

Eine analoge Vorgehensweise ist auch für die Transporte $T(t) = C(t)Q(t)$ möglich mit

$$T(t) = g\big(X_1(t), \ldots, X_p(t)\big) + V(t)\,, \quad t \in J \qquad \textit{Zustandsgleichung}$$

und

$$\begin{aligned} T(t_1) &= g\big(X_1(t_1), \ldots, X_p(t_1)\big) + V(t_1) \\ &\ \vdots \\ T(t_n) &= g\big(X_1(t_n), \ldots, X_p(t_n)\big) + V(t_n) \end{aligned} \qquad \textit{Beobachtungsgleichungen}$$

sowie

$$\widehat{F} = \int_J \widehat{\mu}_T(t)\, dt \quad \text{mit} \quad \widehat{\mu}_T(t) = \widehat{g}\big(X_1(t), \ldots, X_p(t)\big)\,, \quad t \in J\,.$$

Konzentrations- und Transportmodelle sind zwar durch Multiplikation bzw. Division mit $Q(t)$ ineinander überführbar, aber es zeigen sich schon die ersten Schwierigkeiten. Mit derselben Methode geschätzt, ergeben sich andere Ergebnisse, da in der Regel $\widehat{\mu}_T(t) \neq \widehat{\mu}_C(t)Q(t)$ gilt.

Außerdem ist letztlich nur die integrale Größe $F$ gesucht und es ist nicht gesichert, dass durch eine weitere Hinzunahme von Einflussgrößen, die zwar stets die (empirischen) Restgrößen im Sinne des Anpassungskriteriums verringern, auch die Frachtschätzung verbessert wird, im Gegensatz zur Situation beim klassischen linearen Modell. Die Frachtschätzung kann sich bei einer Modellerweiterung sogar verschlechtern, was später auch an Beispielen gezeigt wird.

Ein eher fachliches Problem liegt in der Konzeption der üblichen Modelle. Sind zu verschiedenen Zeitpunkten $t$ die Werte $X_1(t), \ldots, X_p(t)$ der Einflussgrößen gleich, dann sind auch die Schätzwerte $\widehat{\mu}_C(t)$ bzw. $\widehat{\mu}_T(t)$ gleich, die in die Frachtschätzung eingehen. Ob die Annahme realistisch ist, dass bei gleichen Einflussgrößenwerten stets auch die Konzentrations- bzw. Transportwerte identisch sind, muss von Fall zu Fall geprüft werden. Für „gute" Modelle, die vorrangig $C$ bzw. $T$ beschreiben sollen, erscheint es sinnvoll, die Zeit $t$ explizit in die Zustandsgleichung aufzunehmen, da zu verschiedenen Jahreszeiten selbst bei gleichen Werten der Einflussgrößen die Konzentrationen bzw. die Transporte unterschiedlich sein werden.

Ein weiteres methodisches Problem entsteht durch die systematische Zeit-Stichprobe. Da die Zeitpunkte der systematischen Beprobungsstrategie zufällig und abhängig sind, ergeben sich zufällige und abhängige Einflussgrößen $X_1(t_i), \ldots, X_p(t_i)$ für $i = 1, \ldots, n$. In der üblichen statistischen Modelltheorie sind jedoch die Einflussgrößen fest (nicht zufällig). Nur die Restgröße und damit auch die Zielgröße sind dort zufällig. Hier die Restgrößen $U(t)$ bzw. $V(t)$ als Zufallsvariable zu interpretieren, verkompliziert eher noch die Theorie. Die statistischen Eigenschaften der Schätzer wie „Erwartungstreue", „kleinste Varianz" usw. gehen ohnehin verloren. Die modellbasierten und in der Regel nichtlinearen Schätzer sind im allgemeinen verzerrt. In *Hebbel (2006)* wurden erstmals die mittleren quadratischen Fehler MSE verschiedener derartiger Fachtschätzer berechnet und angegeben. Es gelingt zwar nicht, einen besten Schätzer mit kleinstem MSE zu finden, weil zum einen im MSE der unbekannte Frachtwert $F$ enthalten ist und zum anderen beim MSE-Vergleich weitere stoffbezogene Kenngrößen auftreten (so genannte höhere Momente), die von Fall zu Fall unterschiedlich sind. Aber für bestimmte Schätzer ist es möglich anzugeben, ob der eine den anderen dominiert.

Da es stets möglich ist, beliebige Funktionen durch geeignete Transformationen recht gut zu linearisieren, werden im folgenden ohne größere Einschränkungen nur so genannte *lineare Modelle* der Art

$$\begin{aligned} C(t) &= X_1(t)\beta_1 + \ldots + X_p(t)\beta_p + U(t) \\ &= \boldsymbol{x}(t)'\boldsymbol{\beta} + U(t)\,, \quad t \in J \end{aligned} \qquad \text{mit} \quad \boldsymbol{x}(t) = \begin{pmatrix} X_1(t) \\ \vdots \\ X_p(t) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix}$$

bzw.

$$\begin{aligned} T(t) &= Y_1(t)\beta_1 + \ldots + Y_p(t)\beta_p + V(t) \\ &= \boldsymbol{y}(t)'\boldsymbol{\beta} + V(t)\,, \quad t \in J \end{aligned} \qquad \text{mit} \quad \boldsymbol{y}(t) = \begin{pmatrix} Y_1(t) \\ \vdots \\ Y_p(t) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix}$$

betrachtet. Für $Y_1(t) = X_1(t)Q(t), \ldots, Y_p(t) = X_p(t)Q(t)$ und $V(t) = U(t)Q(t)$ sind die Modelle äquivalent.

## Lineare Transport-Modelle

Betrachtet wird das lineare Transport-Modell

$$T(t) = \boldsymbol{y}(t)'\boldsymbol{\beta} + V(t)\,, \;\; t \in J \quad \text{mit} \quad \mu_V = 0 \;\text{ bzw. }\; \mu_T = \boldsymbol{\mu}_y'\boldsymbol{\beta}\,, \;\; \boldsymbol{\mu}_y = \begin{pmatrix} \mu_{Y_1} \\ \vdots \\ \mu_{Y_p} \end{pmatrix}.$$

Infolge der Annahme, dass die Reste im Intervall-Mittel verschwinden, ergibt sich für die Fracht $F$ die Darstellung

$$F = |J|\mu_T = |J|\boldsymbol{\mu}_y'\boldsymbol{\beta} \quad \text{für beliebiges } \boldsymbol{\beta} \text{ mit } \quad \mu_T = \boldsymbol{\mu}_y'\boldsymbol{\beta}\,.$$

Dasjenige $\boldsymbol{\beta}$ mit minimaler theoretischer Intervall-Varianz $\sigma_V^2$ mit der Restriktion $\mu_V = 0$ bzw. $\mu_T = \boldsymbol{\mu}_y'\boldsymbol{\beta}$ ist gegeben durch

$$\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} = \widetilde{\boldsymbol{\beta}} + \frac{\mu_T - \boldsymbol{\mu}_y'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}}{\boldsymbol{\mu}_y'\Sigma_{yy}^{-1}\boldsymbol{\mu}_y}\Sigma_{yy}^{-1}\boldsymbol{\mu}_y \quad \text{mit} \quad \widetilde{\boldsymbol{\beta}} = \Sigma_{yy}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{yT}$$

sowie

$$\Sigma_{yy} = \begin{pmatrix} \sigma_{Y_1Y_1} & \cdots & \sigma_{Y_1Y_p} \\ \vdots & & \vdots \\ \sigma_{Y_pY_1} & \cdots & \sigma_{Y_pY_p} \end{pmatrix}, \;\; \boldsymbol{\sigma}_{yT} = \begin{pmatrix} \sigma_{Y_1T} \\ \vdots \\ \sigma_{Y_pT} \end{pmatrix}$$

und für die Fracht $F$ gilt ansatzgemäß die Darstellung

$$F = |J|\mu_T = |J|\mu_{\widetilde{T}^{(R)}} = |J|\boldsymbol{\mu}_y'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} \quad \text{mit} \quad \widetilde{T}^{(R)}(t) = \boldsymbol{y}(t)'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}.$$

- Statt der Originalwerte $T(t)$ genügen theoretisch die „mittleren" Transportwerte $\widetilde{T}^{(R)}(t)$, die einen Mittelwert aller $T$'s mit gleichem $\boldsymbol{y}$-Wert (zu verschiedenen Zeitpunkten $t$) darstellen, vgl. Abb. 6.

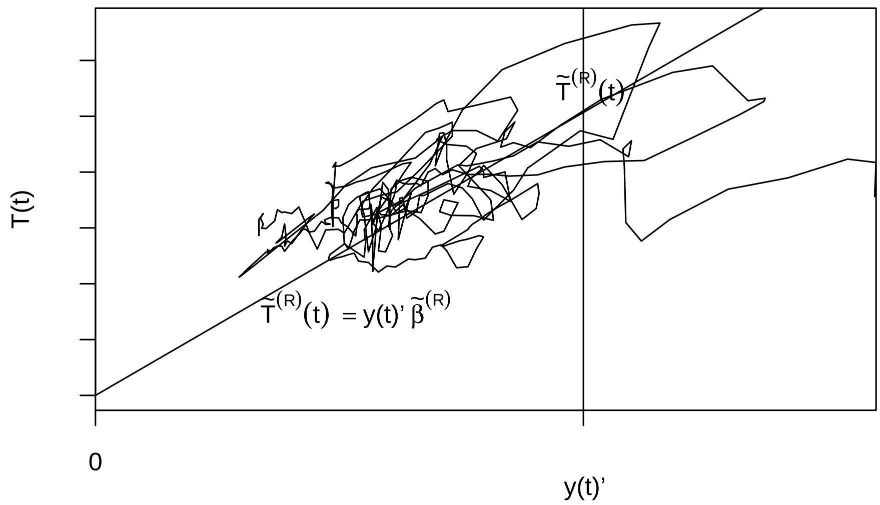



Abb. 6: Zusammenhangshangsplot $(T(t), \boldsymbol{y}(t)')$ mit Mittelwerten $\widetilde{T}^{(R)}(t) = \boldsymbol{y}(t)'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}$.

- Obwohl sich die Einzelwerte $T(t)$ und $\widetilde{T}^{(R)}(t)$ unterscheiden, führen sie konstruktionsgemäß zur gleichen Fracht $F$. Die theoretische Restgröße $\widetilde{V}^{(R)}(t) = T(t) - \widetilde{T}^{(R)}(t)$ hat die kleinste Intervall-Varianz $\sigma^2_{\widetilde{V}^{(R)}}$ unter allen $\sigma_V^2$ mit $\mu_V = 0$. Bezüglich der „Modellgüte" gilt

$$\sigma^2_{\widetilde{V}^{(R)}} = \sigma_T^2 + \sigma^2_{\widetilde{T}^{(R)}} - 2\sigma_{T\widetilde{T}^{(R)}} = \sigma_T^2 - \sigma_{\widetilde{T}}^2 + \frac{(\mu_T - \mu_{\widetilde{T}})^2}{\boldsymbol{\mu}_y'\Sigma_{yy}^{-1}\boldsymbol{\mu}_y} \quad \text{mit} \quad \widetilde{T}(t) = \boldsymbol{y}(t)'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}\,, \;\; \mu_{\widetilde{T}} = \boldsymbol{\mu}_y'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}\,,$$

da

$$\sigma^2_{\widetilde{T}^{(R)}} = \widetilde{\boldsymbol\beta}^{(R)\prime}\Sigma_{yy}\widetilde{\boldsymbol\beta}^{(R)} = \widetilde{\boldsymbol\beta}'\Sigma_{yy}\widetilde{\boldsymbol\beta} + \frac{(\mu_T-\mu_{\widetilde{T}})^2}{\boldsymbol\mu_y'\Sigma_{yy}^{-1}\boldsymbol\mu_y} + 2\frac{\mu_T-\mu_{\widetilde{T}}}{\boldsymbol\mu_y'\Sigma_{yy}^{-1}\boldsymbol\mu_y}\mu_{\widetilde{T}}$$

$$\sigma_{T\widetilde{T}^{(R)}} = \boldsymbol\sigma_{yT}'\widetilde{\boldsymbol\beta}^{(R)} = \boldsymbol\sigma_{yT}'\widetilde{\boldsymbol\beta} + \frac{\mu_T-\mu_{\widetilde{T}}}{\boldsymbol\mu_y'\Sigma_{yy}^{-1}\boldsymbol\mu_y}\mu_{\widetilde{T}}\,, \quad \Sigma_{yy}\widetilde{\boldsymbol\beta} = \boldsymbol\sigma_{yT},$$

also

$$\sigma_T^2 + \frac{(\mu_T-\mu_{\widetilde{T}})^2}{\boldsymbol\mu_y'\Sigma_{yy}^{-1}\boldsymbol\mu_y} = \sigma^2_{\widetilde{T}} + \sigma^2_{\widetilde{V}^{(R)}}.$$

- Im Sonderfall des inhomogenen Modells

  $$T(t) = \alpha + \boldsymbol y(t)'\boldsymbol\beta + V(t)\,,\ \ t\in J \quad \text{mit} \quad \mu_V = 0 \ \text{bzw.}\ \mu_T = \alpha + \boldsymbol\mu_y'\boldsymbol\beta$$

  ist die Restriktion durch $\widetilde{\alpha} = \mu_T - \boldsymbol\mu_y'\widetilde{\boldsymbol\beta}$ stets erfüllt und damit gilt die Darstellung

  $$F = |J|(\widetilde{\alpha} + \boldsymbol\mu_y'\widetilde{\boldsymbol\beta}) = |J|\mu_{\widetilde{T}} \quad \text{mit} \quad \widetilde{T}(t) = \widetilde{\alpha} + \boldsymbol y(t)'\widetilde{\boldsymbol\beta} = \mu_T + (\boldsymbol y(t)-\boldsymbol\mu_y)'\widetilde{\boldsymbol\beta}\,.$$

Zur Schätzung von $F$ über das gewählte Modell muss $\widetilde{\boldsymbol\beta}^{(R)}$ bzw. $\widetilde{\boldsymbol\beta}$ durch eine geeignete Schätzung ersetzt werden. Werden jedoch im Koeffizientenvektor lediglich die unbekannten Größen $\mu_T$ und $\boldsymbol\sigma_{yT}$ durch die entsprechenden empirischen ersetzt, dann ergibt sich

$$\widehat{\widetilde{\boldsymbol\beta}}^{(R)} = \widehat{\widetilde{\boldsymbol\beta}} + \frac{\overline{T} - \boldsymbol\mu_y'\widehat{\widetilde{\boldsymbol\beta}}}{\boldsymbol\mu_y'\Sigma_{yy}^{-1}\boldsymbol\mu_y}\Sigma_{yy}^{-1}\boldsymbol\mu_y \quad \text{mit} \quad \widehat{\widetilde{\boldsymbol\beta}} = \Sigma_{yy}^{-1}\boldsymbol s_{yT},$$

und für die Frachtschätzung gilt $\widehat{F} = |J|\boldsymbol\mu_y'\widehat{\widetilde{\boldsymbol\beta}}^{(R)} = |J|\overline{T} = F_S$. Das Resultat ist der modellunabhängige Stichprobenschätzer. Daher muss ein anderer Weg gefunden werden. Die analoge empirische Vorgehensweise liefert das folgende Resultat:

**3.1 Satz (KQ-Schätzer im linearen Transport-Modell)** Bezüglich der Beobachtungsgleichungen

$$\begin{pmatrix} T(t_1) \\ \vdots \\ T(t_n)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y_1(t_1) & \cdots & Y_p(t_1) \\ \vdots & & \vdots \\ Y_1(t_n) & \cdots & Y_p(t_n)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p\end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V(t_1) \\ \vdots \\ V(t_n)\end{pmatrix}, \quad \text{kurz} \quad \boldsymbol T = \boldsymbol Y\boldsymbol\beta + \boldsymbol v$$

des linearen Transport-Modells $T(t) = \boldsymbol y(t)'\boldsymbol\beta + V(t)$ mit $\mu_V = 0$ ergibt die KQ-Methode $\min_{\boldsymbol\beta}|\boldsymbol v|^2$ unter der Restriktion $\overline{V} = 0$ bzw. $\overline{T} = \overline{\boldsymbol y}'\boldsymbol\beta$ die Schätzung

$$\widehat{\boldsymbol\beta}^{(R)} = \widehat{\boldsymbol\beta} + \frac{\overline{T} - \overline{\widehat{T}}}{\overline{\boldsymbol y}'S_{yy}^{-1}\overline{\boldsymbol y}}S_{yy}^{-1}\overline{\boldsymbol y} \quad \text{mit} \quad \widehat{\boldsymbol\beta} = S_{yy}^{-1}\boldsymbol s_{yT}\,,\ \ \widehat{T}(t) = \boldsymbol y(t)'\widehat{\boldsymbol\beta}\,,$$

wobei $\overline{\boldsymbol y}' = \begin{pmatrix}\overline{Y_1} & \cdots & \overline{Y_p}\end{pmatrix}$ und

$$S_{yy} = \begin{pmatrix} s_{Y_1Y_1} & \cdots & s_{Y_1Y_p} \\ \vdots & & \vdots \\ s_{Y_pY_1} & \cdots & s_{Y_pY_p}\end{pmatrix} = \frac{1}{n}(\boldsymbol Y - \boldsymbol 1\overline{\boldsymbol y}')'(\boldsymbol Y - \boldsymbol 1\overline{\boldsymbol y}'),\ \ \boldsymbol s_{yT} = \begin{pmatrix} s_{Y_1T} \\ \vdots \\ s_{Y_pT}\end{pmatrix} = \frac{1}{n}(\boldsymbol Y - \boldsymbol 1\overline{\boldsymbol y}')'(\boldsymbol T - \boldsymbol 1\overline{T}).$$

Wegen $\widehat{T}^{(R)}(t) = \boldsymbol y(t)'\widehat{\boldsymbol\beta}^{(R)}$, $\mu_{\widehat{T}^{(R)}} = \boldsymbol\mu_y'\widehat{\boldsymbol\beta}^{(R)}$ und $\overline{T} = \overline{\widehat{T}}^{(R)} = \overline{\boldsymbol y}'\widehat{\boldsymbol\beta}^{(R)}$ (nach Ansatz) ist

$$\widehat{F} = |J|\mu_{\widehat{T}^{(R)}} = F_S - |J|(\overline{T} - \mu_{\widehat{T}^{(R)}}) = F_S - |J|(\overline{\boldsymbol y} - \boldsymbol\mu_y)'\widehat{\boldsymbol\beta}^{(R)}.$$

Im Sonderfall des inhomogenen Modells $T(t) = \alpha + \boldsymbol y(t)'\boldsymbol\beta + V(t)$ gilt

$$\widehat{F} = F_S - |J|(\overline{\boldsymbol y} - \boldsymbol\mu_y)'\widehat{\boldsymbol\beta}. \qquad \square$$

- Die Minimierung der empirischen Restvarianz $\frac{1}{n}|\boldsymbol{v}|^2 - \overline{V}^2$ führt zu der unrestringierten Schätzung
$$\widehat{\boldsymbol{\beta}} = S_{yy}^{-1}\boldsymbol{s}_{yT} \quad \text{sowie} \quad \widehat{T}(t) = \boldsymbol{y}(t)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}\,, \quad \mu_{\widehat{T}} = \boldsymbol{\mu}_y'\,\widehat{\boldsymbol{\beta}}$$
und damit
$$\widehat{F} = |J|\mu_{\widehat{T}} = F_S - |J|(\overline{T} - \mu_{\widehat{T}})\,.$$
Im Sonderfall des inhomogenen Modells $T(t) = \alpha + \boldsymbol{y}(t)'\boldsymbol{\beta} + V(t)$ ist $\widehat{\alpha} = \overline{T} - \overline{\boldsymbol{y}}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}$, $\widehat{\boldsymbol{\beta}} = S_{yy}^{-1}\boldsymbol{s}_{yT}$ und $\widehat{T}(t) = \overline{T} + (\boldsymbol{y}(t) - \overline{\boldsymbol{y}})'\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ sowie $\mu_{\widehat{T}} = \overline{T} - (\overline{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{\mu}_y)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}$. Damit ergibt sich in diesem Fall derselbe Schätzer
$$\widehat{F} = |J|\mu_{\widehat{T}} = F_S - |J|(\overline{T} - \mu_{\widehat{T}}) = F_S - |J|(\overline{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{\mu}_y)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}$$
wie zuvor.
- Die Wirkungsweise dieses Modellschätzers für die Fracht $F$ ist im Prinzip plausibel. Wird der Intervall-Mittelwert einer Einflussgröße $Y_k$ durch die Stichprobe nicht richtig erfasst, erfolgt eine „Stetigkeitskorrektur“ des modellunabhängigen Stichprobenschätzers $F_S$. Das Ausmaß der Korrektur hängt von der „Bedeutung“ von $Y_k$ ab. Je geringer die Intervall-Varianz $s^2_{Y_k}$ und je deutlicher ihr linearer Zusammenhang mit $T$ ist ($|s_{Y_kT}| \gg 0$), desto stärker ist die Korrektur.
- Die empirische Restgröße $\widehat{\boldsymbol{v}}^{(R)} = \boldsymbol{T} - \widehat{\boldsymbol{T}}^{(R)}$ mit $\overline{\widehat{\boldsymbol{v}}}^{(R)} = 0$ hat zwar innerhalb des Modells die kleinste Varianz und mit $\widehat{T}(t) = \boldsymbol{y}(t)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ sowie $\overline{\widehat{T}} = \overline{\boldsymbol{y}}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ gilt analog der theoretischen Situation
$$s^2_{\widehat{V}(R)} = s^2_T + s^2_{\widehat{T}(R)} - 2s_{T\widehat{T}(R)} = s^2_T - s^2_{\widehat{T}} + \frac{(\overline{T} - \overline{\widehat{T}})^2}{\overline{\boldsymbol{y}}'S_{yy}^{-1}\overline{\boldsymbol{y}}}, \ \text{ also } \ s^2_T + \frac{(\overline{T} - \overline{\widehat{T}})^2}{\overline{\boldsymbol{y}}'S_{yy}^{-1}\overline{\boldsymbol{y}}} = s^2_{\widehat{T}} + s^2_{\widehat{V}(R)},$$
aber es ist nicht gesichert, dass ein größeres Modell mit weiteren Einflussgrößen auch bessere Schätzungen für die Fracht liefert, obwohl die empirische Restvarianz nicht größer werden kann, siehe Anhang A5 und folgenden Punkt.
- Für den mittleren quadratischen Fehler gilt
$$\mathsf{MSE}(\widehat{F}, F) = |J|^2\mathsf{E}\big((\mu_{\widehat{T}(R)} - \mu_T)^2\big) = |J|^2\mu_y'\mathsf{E}\big((\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} - \boldsymbol{\beta})(\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} - \boldsymbol{\beta})'\big)\mu_y\,,$$
wobei $\boldsymbol{\beta}$ auch durch $\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}$ ersetzt werden kann, da $\mu_T = \boldsymbol{\mu}_y'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}$. Je besser der Schätzer $\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}$ für $\boldsymbol{\beta}$ bzw. $\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}$ ist, um so besser ist auch der Frachtschätzer. An dieser Stelle ist ersichtlich, dass eine Modellerweiterung durch unbedeutende Einflussgrößen den Frachtschätzer verschlechtern kann, weil dann die entsprechenden Koeffizientenschätzer große Unsicherheiten aufweisen. Im Anhang A6 wird das „Parsimonitätsprinzip“, also das sparsame Umgehen mit den Einflussgrößen, am Beispiel des klassischen linearen Prognosemodells näher erläutert. Die Ergebnisse sind im Wesentlichen auch auf zufällige Einflussgrößen übertragbar.
- Im Vergleich zu $F_S$ ist
$$\mathsf{MSE}(\widehat{F}, F) = \mathsf{MSE}(F_S, F) + |J|^2\mathsf{E}\big((\overline{T} - \mu_{\widehat{T}(R)})^2\big) - 2|J|^2\mathsf{E}\big((\overline{T} - \mu_T)(\overline{T} - \mu_{\widehat{T}(R)})\big).$$
Nur für den Fall, dass
$$\mathsf{E}\big((\overline{T} - \mu_{\widehat{T}(R)})^2\big) < 2\mathsf{Cov}\big(\overline{T}, \overline{T} - \mu_{\widehat{T}(R)}\big)$$
gilt, ist der Modell-Frachtschätzer besser als der Stichproben-Frachtschätzer.

Spezialfälle für Transport-Modell-Frachtschätzer sind in Tab. 5 aufgeführt:

Tab. 5: Transport-Modell-Frachtschätzer $\widehat{F}$

| Nr. | Frachtschätzer $\widehat{F}^{(\cdot)}$ | Modell |
|---|---|---|
| 5 | $F_S \cdot \frac{\mu_Q}{\overline{Q}}$ | $T(t) = Q(t)\beta + V(t), \;\; \beta = \frac{\mu_T}{\mu_Q}$ |
| 6 | $F_S - \lvert J\rvert(\overline{Q} - \mu_Q)\frac{s_{TQ}}{s_Q^2}$ | $T(t) = \alpha + Q(t)\beta + V(t), \;\; \alpha = \mu_T - \mu_Q\beta$ |
| 6a | $F_S - \lvert J\rvert(\overline{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{\mu}_y)' S_{yy}^{-1}\boldsymbol{s}_{yT}$ | $T(t) = \alpha + \boldsymbol{y}(t)'\boldsymbol{\beta} + V(t), \;\; \alpha = \mu_T - \boldsymbol{\mu}_y'\boldsymbol{\beta}$ |

**Schätzer 5** Es gilt nach Satz 3.1

$$\widehat{\beta}^{(R)} = \widehat{\beta} + \frac{1}{\overline{Q}}(\overline{T} - \overline{Q}\widehat{\beta}) = \frac{\overline{T}}{\overline{Q}}, \;\; \widehat{F}^{(5)} = |J|\mu_Q\widehat{\beta}^{(R)} = |J|\overline{T}\cdot\frac{\mu_Q}{\overline{Q}} = F_S\cdot\frac{\mu_Q}{\overline{Q}} = F_S - |J|(\overline{Q} - \mu_Q)\widehat{\beta}^{(R)},$$

genannt *Verhältnisschätzer*. Aus

$$\widehat{F}^{(5)} = F_S - |J|\big((\overline{Q} - \mu_Q)\beta + R\big) \quad \text{mit} \quad R = (\overline{Q} - \mu_Q)(\widehat{\beta}^{(R)} - \beta)\,, \;\; F_S = |J|\overline{T}$$

ergibt sich

$$\mathrm{MSE}(\widehat{F}^{(5)}, F) \approx \mathrm{MSE}(F_S, F) + |J|^2(\beta^2\overline{\Sigma}_{QQ} - 2\beta\overline{\Sigma}_{TQ}) < \mathrm{MSE}(F_S, F)$$

genau dann, wenn

$$\frac{\overline{\Sigma}_{QQ}}{\mu_Q^2} < 2\frac{\overline{\Sigma}_{TQ}}{\mu_T\mu_Q}\,.$$

**Schätzer 6** Aus Satz 3.1 folgt unmittelbar

$$\widehat{\beta} = \frac{s_{TQ}}{s_Q^2}\,, \quad \widehat{F}^{(6)} = F_S - |J|(\overline{Q} - \mu_Q)\widehat{\beta}$$

und

$$\widehat{F}^{(6)} = F_S - |J|\big((\overline{Q} - \mu_Q)\widetilde{\beta} + R\big) \quad \text{mit} \quad R = (\overline{Q} - \mu_Q)(\widehat{\beta} - \widetilde{\beta})\,, \;\; \widetilde{\beta} = \frac{\sigma_{TQ}}{\sigma_Q^2}$$

sowie

$$\mathrm{MSE}(\widehat{F}^{(6)}, F) \approx \mathrm{MSE}(F_S, F) + |J|^2(\widetilde{\beta}^2\overline{\Sigma}_{QQ} - 2\widetilde{\beta}\overline{\Sigma}_{TQ}) < \mathrm{MSE}(F_S, F)$$

genau dann, wenn

$$\frac{\overline{\Sigma}_{QQ}}{\sigma_Q^2} < 2\frac{\overline{\Sigma}_{TQ}}{\sigma_{TQ}}\,.$$

**Schätzer 6a** Dieser Schätzer ist für $\boldsymbol{y}(t) = Q(t)$ der Schätzer 6. Exemplarisch wird dieser Schätzer im Kapitel 4 mit den Einflussgrößen

$$\boldsymbol{y}(t)' = \big(\, Q(t) \;\; Q^2(t) \;\; \frac{1}{Q(t)} \,\big)$$

betrachtet. Damit soll dokumentiert werden, dass eine Modellerweiterung auch zu schlechteren Frachtschätzungen führen kann.

### Lineare inhomogene Konzentrations-Modelle

Zugrunde liegt das lineare inhomogene Konzentrations-Modell

$$\begin{aligned} C(t) &= \alpha + \boldsymbol{x}(t)'\boldsymbol{\beta} + U(t) \quad \text{mit} \quad \mu_U = 0 \ \text{bzw.} \ \mu_C = \alpha + \boldsymbol{\mu}_x'\boldsymbol{\beta} \ \text{und} \ \sigma_{UQ} = 0 \\ C(t) &= \mu_C + (\boldsymbol{x}(t) - \boldsymbol{\mu}_x)'\boldsymbol{\beta} + U(t)\,, \quad t \in J\,, \end{aligned}$$

wie eingangs beschrieben und mit entsprechenden Bezeichnungen wie zuvor. Daraus ergibt sich durch Multiplikation mit $Q(t)$ das Transportmodell

$$\begin{aligned} T(t) &= Q(t)\alpha + Q(t)\boldsymbol{x}(t)'\boldsymbol{\beta} + U(t)Q(t) \quad \text{mit} \quad \sigma_{UQ} = 0 \ \text{bzw.} \ \sigma_{CQ} = \boldsymbol{\sigma}_{xQ}'\boldsymbol{\beta} \\ T(t) &= \mu_C\mu_Q + Q(t)(\boldsymbol{x}(t) - \boldsymbol{\mu}_x)'\boldsymbol{\beta} + U(t)Q(t)\,, \quad t \in J\,. \end{aligned}$$

Für die Fracht $F$ gilt dann die Darstellung

$$F = |J|\mu_T = |J|(\mu_C\mu_Q + \boldsymbol{\sigma}_{xQ}'\boldsymbol{\beta}) \quad \text{für beliebige } \boldsymbol{\beta} \text{ mit} \quad \mu_T = \mu_C\mu_Q + \boldsymbol{\sigma}_{xQ}'\boldsymbol{\beta}\,.$$

Dasjenige Paar $(\alpha, \boldsymbol{\beta})$ mit minimaler theoretischer Intervallvarianz $\sigma_U^2$ unter den Restriktionen $\mu_U = 0$ bzw. $\alpha = \mu_C - \boldsymbol{\mu}_x'\boldsymbol{\beta}$ und $\sigma_{UQ} = 0$ ist gegeben durch

$$\widetilde{\alpha}^{(R)} = \mu_C - \boldsymbol{\mu_x}'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}, \quad \widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} = \widetilde{\boldsymbol{\beta}} + \frac{\sigma_{CQ} - \boldsymbol{\sigma}_{xQ}'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}}{\boldsymbol{\sigma}_{xQ}'\Sigma_{xx}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{xQ}}\Sigma_{xx}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{xQ} \quad \text{und} \quad \widetilde{\boldsymbol{\beta}} = \Sigma_{xx}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{xC}.$$

- Statt der Originalwerte $C(t)$ in $T(t) = C(t)Q(t)$ führen demnach auch die „mittleren“ Konzentrationswerte

  $$\widetilde{C}^{(R)}(t) = \mu_C + (\boldsymbol{x}(t) - \boldsymbol{\mu}_x)'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} \quad \text{von} \quad C(t)\,, \quad t \in J\,,$$

  die bei gleichen $\boldsymbol{x}(t)$-Werten zu verschiedenen Zeitpunkten $t$ identisch sind, zur Fracht $F$, denn

  $$\int_J \widetilde{C}^{(R)}(t)Q(t)\,dt = |J|(\mu_C\mu_Q + \boldsymbol{\sigma}_{xQ}'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}) = |J|\mu_T = F\,,$$

  vgl. die äquivalente Situation im linearen Transport-Modell in Abb. 6.
- Ist eine der Einflussgrößen der Abfluss, ohne Einschränkung $X_1 = Q$, dann werden für die Darstellung der Fracht $F$ die übrigen Einflussgrößen $\boldsymbol{x}_2(t)'$ aus $\boldsymbol{x}(t)' = (\, X_1(t) \;\; \boldsymbol{x}_2(t)'\,)$ nicht benötigt (im Gegensatz zu den „mittleren“ Konzentrationswerten $\widetilde{C}^{(R)}(t)$), denn ihr Beitrag zur Fracht verschwindet:

  Aus

  $$\Sigma_{xx} = \begin{pmatrix} \sigma_Q^2 & \boldsymbol{\sigma}_{x_2Q}' \\ \boldsymbol{\sigma}_{x_2Q} & \Sigma_{x_2x_2} \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{\sigma}_{xQ} = \begin{pmatrix} \sigma_Q^2 \\ \boldsymbol{\sigma}_{x_2Q} \end{pmatrix}, \ \Sigma_{xx}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{xQ} = \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{\sigma}_{xC} = \begin{pmatrix} \sigma_{CQ} \\ \boldsymbol{\sigma}_{x_2C} \end{pmatrix},$$

  folgt

  $$\boldsymbol{\sigma}_{xQ}'\widetilde{\boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sigma_{CQ} \\ \boldsymbol{\sigma}_{x_2C} \end{pmatrix} = \sigma_{CQ}, \quad \text{also} \quad \widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} = \widetilde{\boldsymbol{\beta}}$$

  und damit

  $$F = |J|\mu_T = |J|(\mu_C\mu_Q + \boldsymbol{\sigma}_{xQ}'\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}) = |J|(\mu_C\mu_Q + \sigma_{CQ})\,,$$

  in Übereinstimmung mit der „Verschiebeformel“ $\sigma_{CQ} = \mu_T - \mu_C\mu_Q$.

- Zur exakten Frachtberechnung genügt damit theoretisch das einfache lineare Regressionsmodell

$$C(t) = \alpha + Q(t)\beta + U(t) \quad \text{mit} \quad \mu_U = 0 \ \text{bzw.}\ \mu_C = \alpha + \mu_Q\beta \quad \text{und} \quad \sigma_{UQ} = 0\,,$$

  denn

$$\begin{aligned} C(t) &= \mu_C + (Q(t) - \mu_Q)\beta + U(t) \\ T(t) &= \mu_C Q(t) + Q(t)(Q(t) - \mu_Q)\beta + U(t)Q(t) \quad \text{mit} \quad \sigma_{UQ} = 0\,, \end{aligned}$$

  also

$$\mu_T = \mu_C\mu_Q + \sigma_Q^2\,, \quad \beta = \frac{\sigma_{CQ}}{\sigma_Q^2}.$$

Zur Schätzung von $F$ über das gewählte Modell muss $\widetilde{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}$ durch eine geeignete Schätzung ersetzt werden. Wird dazu

$$\widehat{\widehat{\alpha}}^{(R)} = \overline{C} - \boldsymbol{\mu}_x'\widehat{\widehat{\boldsymbol{\beta}}}^{(R)}, \quad \widehat{\widehat{\boldsymbol{\beta}}}^{(R)} = \widehat{\widehat{\boldsymbol{\beta}}} + \frac{s_{CQ} - \boldsymbol{\sigma}_{xQ}'\widehat{\widehat{\boldsymbol{\beta}}}}{\boldsymbol{\sigma}_{xQ}'\Sigma_{xx}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{xQ}}\Sigma_{xx}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{xQ} \quad \text{mit} \quad \widehat{\widehat{\boldsymbol{\beta}}} = \Sigma_{xx}^{-1}\boldsymbol{s}_{xC}$$

gewählt, ergibt sich

$$\widehat{F} = |J|(\overline{C}\mu_Q + \boldsymbol{\sigma}_{xQ}'\widehat{\widehat{\boldsymbol{\beta}}}^{(R)}) = |J|(\overline{C}\mu_Q + s_{CQ}) = F^{(1)}$$

und die Schätzung ist unabhängig vom gewählten Modell. Auch hier, wie schon beim Transport-Modell, wird daher wie folgt verfahren.

**3.2 Satz** In dem Modell

$$C(t) = \alpha + \boldsymbol{x}(t)'\boldsymbol{\beta} + U(t)\,, \quad T(t) = C(t)Q(t) \quad \text{mit} \quad \mu_U = 0\,, \quad \sigma_{UQ} = 0$$

und den Beobachtungsgleichungen ($i = 1, \ldots, n$)

$$\begin{aligned} C(t_i) &= \alpha + \boldsymbol{x}(t_i)'\boldsymbol{\beta} + U(t_i) \quad \text{mit} \quad \overline{U} = 0 \ \text{bzw.}\ \overline{C} = \alpha + \overline{\boldsymbol{X}}'\beta \\ T(t_i) &= \overline{C}Q(t_i) + Q(t_i)(\boldsymbol{x}(t_i) - \overline{X})'\boldsymbol{\beta} + U(t_i)Q(t_i) \quad \text{mit} \quad s_{UQ} = 0 \ \text{bzw.}\ s_{CQ} = \boldsymbol{s}_{xQ}'\boldsymbol{\beta} \end{aligned}$$

ist der restringierte KQ-Schätzer für $\alpha$, $\boldsymbol{\beta}$ gegeben durch

$$\widehat{\alpha}^{(R)} = \overline{C} - \overline{\boldsymbol{X}}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}, \quad \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} = \widehat{\boldsymbol{\beta}} + \frac{s_{CQ} - \boldsymbol{s}_{xQ}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}}{\boldsymbol{s}_{xQ}'S_{xx}^{-1}\boldsymbol{s}_{xQ}}S_{xx}^{-1}\boldsymbol{s}_{xQ} \quad \text{mit} \quad \widehat{\boldsymbol{\beta}} = S_{xx}^{-1}\boldsymbol{s}_{xC}\,.$$

Für den Frachtschätzer gilt dann

$$\widehat{F} = |J|\mu_{\widehat{T}^{(R)}} = |J|\big(\overline{C}\mu_Q + (\boldsymbol{\mu}_{xQ} - \mu_Q\overline{\boldsymbol{X}})'\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}\big) = |J|\big(\overline{C}\mu_Q + (\boldsymbol{\sigma}_{xQ} - \mu_Q(\overline{\boldsymbol{X}} - \boldsymbol{\mu}_x))'\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}\big)\,.$$

und im Vegleich zu $F_S = |J|\overline{T}$ mit $\overline{T} = \overline{C}\,\overline{Q} + s_{CQ}$, $s_{CQ} = \boldsymbol{s}_{xQ}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}$ ist

$$\widehat{F} = F_S - |J|\big(\overline{C}(\overline{Q} - \mu_Q) + (\boldsymbol{s}_{xQ} - \boldsymbol{\sigma}_{xQ} + \mu_Q(\overline{\boldsymbol{X}} - \boldsymbol{\mu}_x))'\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)}\big)\,.$$

**Beweis** Aus

$$\begin{aligned} \widehat{T}^{(R)}(t) &= \widehat{C}^{(R)}(t)Q(t) \\ &= \overline{C}Q(t) + Q(t)(\boldsymbol{x}(t) - \overline{\boldsymbol{X}})'\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} \end{aligned} \quad \text{und} \quad \begin{aligned} \widehat{C}^{(R)}(t) &= \widehat{\alpha}^{(R)} + \boldsymbol{x}(t)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} \\ &= \overline{C} + (\boldsymbol{x}(t) - \overline{\boldsymbol{X}})'\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} \end{aligned}$$

sowie $\boldsymbol{\sigma}_{xQ} = \boldsymbol{\mu}_{xQ} - \boldsymbol{\mu}_x\mu_Q$ folgt unmittelbar die Behauptung.

- Ansatzgemäß gilt infolge der Nebenbedingungen
$$\overline{\widehat{C}}^{(R)} = \overline{C} \quad \text{und} \quad \overline{\widehat{T}}^{(R)} = \overline{C}\,\overline{Q} + \boldsymbol{s}_{xQ}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} = \overline{C}\,\overline{Q} + s_{CQ} = \overline{T}\,.$$

- Die Wirkungsweise des Konzentrations-Modell-Frachtschätzers ist in der vergleichenden Darstellung mit $F_S$ ersichtlich. Wie bereits beim Transport-Modell-Frachtschätzer erfolgt eine „Stetigkeitskorrektur", wenn die Mittelwerte der Einflussgrößen $X_k$ durch die Stichprobe nicht richtig erfasst werden. Darüber hinaus ergeben sich aber auch Änderungen, wenn der Mittelwert vom Abfluss $Q$ sowie die Intervallkovarianzen der Einflussgrößen $X_k$ und dem Abfluss $Q$ durch die Stichprobe nicht korrekt wiedergegeben werden. Die Richtung der Korrekturen ist an den Vorzeichen abzulesen und die verschiedenen Korrekturen können sich auch gegeneinander aufheben.
- Ist eine der Einflussgrößen der Abfluss, ohne Einschränkung $X_1 = Q$, dann werden die restlichen Einflussgrößen $\boldsymbol{x}_2(t)'$ aus $\boldsymbol{x}(t)' = (\,Q(t) \;\; \boldsymbol{x}_2(t)'\,)$ in der Modellgleichung
$$C(t) = \alpha + Q(t)\beta_1 + \boldsymbol{x}_2(t)'\boldsymbol{\beta}_2 + U(t)\,, \quad t \in J$$
zwar nicht überflüssig (entgegen der theoretischen Situation), jedoch vereinfacht sich der Schätzer zu
$$\begin{aligned}\widehat{F} &= |J|\mu_{\widehat{T}} = |J|\big(\overline{C}\mu_Q + (\boldsymbol{\mu}_{xQ} - \mu_Q\overline{\boldsymbol{X}})'\widehat{\boldsymbol{\beta}}\big)\\ &= F_S - |J|\big(\overline{C}(\overline{Q} - \mu_Q) + (\boldsymbol{s}_{xQ} - \boldsymbol{\sigma}_{xQ} + \mu_Q(\overline{\boldsymbol{X}} - \boldsymbol{\mu}_X))'\widehat{\boldsymbol{\beta}}\big)\end{aligned}$$
bzw.
$$\begin{aligned}\widehat{F} &= |J|\big(\overline{C}\mu_Q + (\mu_{Q^2} - \mu_Q\overline{Q})\tfrac{s_{CQ}}{s_Q^2}\big) + \widehat{F}_2\\ &= F_S - |J|\big(\overline{C}(\overline{Q} - \mu_Q) + (s_Q^2 - \sigma_Q^2 + \mu_Q(\overline{Q} - \mu_Q))\tfrac{s_{CQ}}{s_Q^2}\big) + \widehat{F}_2\end{aligned}$$
mit
$$\widehat{F}_2 = |J|\big(\boldsymbol{\mu}_{x_2Q} - \mu_Q\overline{\boldsymbol{X}}_2 - (\mu_{Q^2} - \mu_Q\overline{Q})\tfrac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}}{s_Q^2}\big)'\big(S_{x_2x_2} - \tfrac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}\boldsymbol{s}_{x_2Q}'}{s_Q^2}\big)^{-1}\big(\boldsymbol{s}_{x_2C} - \tfrac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}s_{CQ}}{s_Q^2}\big)\,.$$
Beweis: Aus $\overline{\boldsymbol{X}}' = (\overline{Q} \;\; \overline{\boldsymbol{X}}_2')$, $\boldsymbol{\mu}_{xQ}' = (\mu_{Q^2} \;\; \boldsymbol{\mu}_{x_2Q}')$ und
$$S_{xx} = \begin{pmatrix} s_Q^2 & \boldsymbol{s}_{x_2Q}' \\ \boldsymbol{s}_{x_2Q} & S_{x_2x_2}\end{pmatrix},\;\; \boldsymbol{s}_{xQ} = \begin{pmatrix} s_Q^2 \\ \boldsymbol{s}_{x_2Q}\end{pmatrix},\;\; S_{xx}^{-1}\boldsymbol{s}_{xQ} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\;\; \boldsymbol{s}_{xC} = \begin{pmatrix} s_{CQ} \\ \boldsymbol{s}_{x_2C}\end{pmatrix},\;\; \widehat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix}\widehat{\beta}_1 \\ \widehat{\boldsymbol{\beta}}_2\end{pmatrix}$$
folgt unmittelbar
$$\boldsymbol{s}_{xQ}'\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}s_{CQ}\\ \boldsymbol{s}_{x_2Q}\end{pmatrix} = s_{CQ} \quad \text{und demnach} \quad \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(R)} = \widehat{\boldsymbol{\beta}} = S_{xx}^{-1}\boldsymbol{s}_{xC}\,.$$
Die zweite Darstellung von $\widehat{F}$ ergibt sich durch Auflösung des Gleichungssystems
$$S_{xx}\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{s}_{xC} \quad \text{bzw.} \quad \begin{aligned} s_Q^2\widehat{\beta}_1 + \boldsymbol{s}_{x_2Q}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 &= s_{CQ}\\ \boldsymbol{s}_{x_2Q}\widehat{\beta}_1 + S_{x_2x_2}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 &= \boldsymbol{s}_{x_2C}\end{aligned}$$
d. h.
$$\widehat{\beta}_1 = \frac{s_{CQ}}{s_Q^2} - \frac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}'}{s_Q^2}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 \quad \text{und} \quad \widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 = \big(S_{x_2x_2} - \tfrac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}\boldsymbol{s}_{x_2Q}'}{s_Q^2}\big)^{-1}\big(\boldsymbol{s}_{x_2C} - \tfrac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}s_{CQ}}{s_Q^2}\big)\,.$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}\widehat{F} &= |J|\big(\overline{C}\mu_Q + (\mu_{Q^2} - \mu_Q\overline{Q})\widehat{\beta}_1 + (\boldsymbol{\mu}_{x_2Q} - \mu_Q\overline{\boldsymbol{X}}_2)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2\big) \\ &= |J|\big(\overline{C}\mu_Q + (\mu_{Q^2} - \mu_Q\overline{Q})\frac{s_{CQ}}{s_Q^2}\big) + |J|\big(\boldsymbol{\mu}_{x_2Q} - \mu_Q\overline{\boldsymbol{X}}_2 - (\mu_{Q^2} - \mu_Q\overline{Q})\frac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}}{s_Q^2}\big)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 \,.\end{aligned}$$

Bemerkung: Der Summand

$$\widehat{F}_1 = |J|\big(\overline{C}\mu_Q + (\mu_{Q^2} - \mu_Q\overline{Q})\frac{s_{CQ}}{s_Q^2}\big)$$

in der Darstellung von $\widehat{F}$ entspricht der Frachtschätzung bezüglich $C$ im einfachen linearen $C$-$Q$-Modell

$$C(t) = \alpha + Q(t)\beta_{10} + U(t)\,, \quad t \in J \quad \text{mit} \quad \widehat{\alpha} = \overline{C} - \overline{Q}\widehat{\beta}_{10}\,,\ \widehat{\beta}_{10} = \frac{s_{CQ}}{s_Q^2}\,.$$

Der Summand $\widehat{F}_2$ stellt die Frachtschätzung bezüglich der Restkonzentration

$$\widehat{U}(t) = C(t) - \widehat{\alpha} - Q(t)\widehat{\beta}_{10} = C(t) - \overline{C} - (Q(t) - \overline{Q})\frac{s_{CQ}}{s_Q^2} \quad \text{mit} \quad s_{\widehat{U}Q} = 0$$

im Modell

$$\widehat{U}(t) = \widehat{\boldsymbol{v}}_2(t)'\boldsymbol{\beta}_{20} + V(t) \quad \text{mit} \quad \widehat{\boldsymbol{v}}_2(t) = \boldsymbol{x}_2(t) - \overline{\boldsymbol{X}}_2 - (Q(t) - \overline{Q})\frac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}}{s_Q^2}\,,\ \boldsymbol{s}_{\widehat{v}_2Q} = 0$$

dar, denn unter Anwendung von Satz 3.2 mit $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{20}^{(R)} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_{20}$ und wegen $\overline{\widehat{U}} = 0$, $\overline{\widehat{\boldsymbol{V}}}_2 = 0$ gilt

$$\begin{aligned}\widehat{F}_2 &= |J|\big(\overline{\widehat{U}}\mu_Q + (\boldsymbol{\mu}_{v_2Q} - \mu_Q\overline{\widehat{\boldsymbol{V}}}_2)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{20}\big) = |J|\boldsymbol{\mu}_{v_2Q}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{20} \\ &= |J|\big(\boldsymbol{\mu}_{x_2Q} - \mu_Q\overline{\boldsymbol{X}}_2 - (\mu_{Q^2} - \mu_Q\overline{Q})\frac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}}{s_Q^2}\big)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{20}\,, \quad \widehat{\boldsymbol{\beta}}_{20} = S_{\widehat{v}_2\widehat{v}_2}^{-1}\boldsymbol{s}_{\widehat{v}_2\widehat{U}}\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned}S_{\widehat{v}_2\widehat{v}_2} &= S_{x_2x_2} + \frac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}\boldsymbol{s}_{x_2Q}'}{s_Q^2} - 2\frac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}\boldsymbol{s}_{x_2Q}'}{s_Q^2} = S_{x_2x_2} - \frac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}\boldsymbol{s}_{x_2Q}'}{s_Q^2}\,, \\ \boldsymbol{s}_{\widehat{v}_2\widehat{U}} &= \boldsymbol{s}_{x_2C} + \frac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}s_{CQ}}{s_Q^2} - 2\frac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}s_{CQ}}{s_Q^2} = \boldsymbol{s}_{x_2C} - \frac{\boldsymbol{s}_{x_2Q}s_{CQ}}{s_Q^2}\,.\end{aligned}$$

Dabei sind die Einflussgrößen $\widehat{\boldsymbol{v}}_2(t)$ die um den linearen Einfluss von $Q$ bereinigten $\boldsymbol{x}_2(t)$. Theoretisch haben also sowohl die Reste $U(t)$ als auch die Reste $\boldsymbol{v}_2(t)$ jeweils die Fracht Null.

- Wie bereits allgemein bei der Modellierung erwähnt, führt eine Hinzunahme weiterer Einflussgrößen zwar zu einer geringeren empirischen Varianz der Restkomponente, die Unsicherheiten in der Schätzung der Koeffizienten übertragen sich jedoch auf die Frachtschätzung, so dass diese sogar schlechter werden kann (im Sinne des MSE). Da theoretisch bereits ein lineares $C$-$Q$-Modell ausreicht, um die Fracht $F$ darzustellen, erscheint es empfehlenswert, empirisch auch nur ein derartiges Modell zu verwenden, es sei denn, die Einflussgrößen sind hoch mit $C$ intervall-korreliert, so dass die Restgröße nahezu verschwindet.

Spezialfälle für Konzentrations-Modell-Schätzer, die in die empirischen Untersuchungen aufgenommen werden, sind in Tab. 6 aufgeführt.

Tab. 6: Konzentrations-Modell-Frachtschätzer $\widehat{F}$

| Nr. | Frachtschätzer $\widehat{F}^{(\cdot)}$ |
|---|---|
| 7 | $F_S - \lvert J\rvert\big(\overline{C}(\overline{Q}-\mu_Q) + (s_Q^2-\sigma_Q^2 + \mu_Q(\overline{Q}-\mu_Q))\frac{s_{CQ}}{s_Q^2}\big)$ |
| | Modell: $C(t) = \alpha + Q(t)\beta + U(t)$ mit $\mu_U = 0\,,\ \sigma_{UQ} = 0$ |
| 7a | $F_S - \lvert J\rvert\big(\overline{C}(\overline{Q}-\mu_Q) + (\boldsymbol{s}_{xQ}-\boldsymbol{\sigma}_{xQ} + \mu_Q(\overline{X}-\boldsymbol{\mu}_X))'S_{xx}^{-1}\boldsymbol{s}_{xC}\big)$ |
| | Modell: $C(t) = \alpha + \boldsymbol{x}(t)'\boldsymbol{\beta} + U(t)$ mit $\boldsymbol{x}(t)' = (Q(t)\ \boldsymbol{x}_2(t)')\,,\ \mu_U = 0\,,\ \sigma_{UQ} = 0$ |

**Schätzer 7** Dieser Schätzer entspricht $\widehat{F}^{(7a)}$ mit $\boldsymbol{x}(t) = Q(t)$ und ist methodisch sinnvoll, da bereits das lineare $C$-$Q$-Modell theoretisch zur Fracht $F$ führt. Ohne den zweiten Summanden entsteht der Schätzer $\widehat{F}^{(1)} = F_S - |J|\overline{C}(\overline{Q} - \mu_Q)$. Zur (näherungsweisen) Berechnung des mittleren quadratischen Fehlers ist die Umformung

$$\begin{aligned}\widehat{F}^{(7)} &= F_S - |J|\big(\mu_C(\overline{Q}-\mu_Q) + (s_Q^2-\sigma_Q^2 + \mu_Q(\overline{Q}-\mu_Q))\frac{\sigma_{CQ}}{\sigma_Q^2} + R\big)\\ &= F_S - |J|\big((\mu_C+\mu_Q\frac{\sigma_{CQ}}{\sigma_Q^2})(\overline{Q}-\mu_Q) + (s_Q^2-\sigma_Q^2)\frac{\sigma_{CQ}}{\sigma_Q^2} + R\big)\end{aligned}$$

mit

$$R = (\overline{C}-\mu_C)(\overline{Q}-\mu_Q) + (s_Q^2-\sigma_Q^2 + \mu_Q(\overline{Q}-\mu_Q))\big(\frac{s_{CQ}}{s_Q^2} - \frac{\sigma_{CQ}}{\sigma_Q^2}\big)$$

nützlich. In grober Näherung (unter Fortlassung dritter und vierter Momente) gilt dann

$$\mathrm{MSE}(\widehat{F}^{(7)}, F) - \mathrm{MSE}(F_S, F) \approx |J|^2\big((\mu_C+\mu_Q\frac{\sigma_{CQ}}{\sigma_Q^2})^2\overline{\Sigma}_{QQ} - 2(\mu_C+\mu_Q\frac{\sigma_{CQ}}{\sigma_Q^2})\overline{\Sigma}_{TQ}\big).$$

Der Schätzer $\widehat{F}^{(7)}$ ist also (meist) dann besser als $F_S$, wenn

$$\frac{\overline{\Sigma}_{QQ}}{\sigma_Q^2} < 2\frac{\overline{\Sigma}_{TQ}}{\mu_C\sigma_Q^2+\mu_Q\sigma_{CQ}}$$

gilt. Diese Bedingung ähnelt denen der Schätzer 1, 5 und 6.

**Schätzer 7a** Exemplarisch wird dieser Schätzer im Kapitel 4 zum einen mit den Einflussgrößen

$$\boldsymbol{x}(t)' = (\,Q(t)\ \ Q^2(t)\ \ \frac{1}{Q(t)}\ \ \cos\tfrac{2\pi}{364}t\ \ \sin\tfrac{2\pi}{364}t\,)$$

und zum anderen mit sachlogisch begründeten Regressoren wie die Leitfähigkeit $LF$ (für den Chloridgehalt $CL$) und die Temperatur $T$ (für den Sauerstoffgehalt $O_2$) betrachtet. Damit soll dokumentiert werden, dass eine Modellerweiterung sogar zu einem schlechteren Frachtschätzer führen kann und nur solche Modelle geeignet sind, die die Zielgröße sehr gut beschreiben.

# 4 Beispiele für empirische Frachtberechnungen

Für die exemplarischen empirischen Frachtbrechnungen werden zum einen der anonyme quasi-kontinuierliche

**Datensatz 1** Abfluss $Q$, Konzentrationen $C1$ bis $C7$

aus Abschnitt 2.2.3 in Form der Tagesmittelwerte an einer Messstelle und zum anderen ein umfangreicher quasi-kontinuierlicher **Datensatz 2** von Tages(mittel)werten bzw. Tagesmischproben aus Tab. 7 herangezogen.

Tab. 7: Datensatz 2 zum Frachtberechnungsvergleich

| Messstelle | Messgröße $C$ | Zeitraum |
|---|---|---|
| Bimmen, Rhein | Q | 75 – 89 |
| Tagesmittelwerte | CL, LF als Modell-Einflussgröße | 75 – 88 |
| | $O_2$, T als Modell-Einflussgröße 76 – 85 | 75 – 89 |
| Tagesmischproben | CL, $NO_3$, $NH_4$, $KMnO_4$ | 76 – 87 |
| | CSB | 76 – 86 |
| | BSB | 76 – 84 |
| | $NO_2$ | 77 – 84 |
| Mainz, Rhein | Q | 78 – 89 |
| | CL, LF als Modell-Einflussgröße | 82 – 89 |
| | $NO_x$, $PO_4$, $O_2$ | 78 – 89 |
| Palzem, Mosel | Q | 76 – 90 |
| | CL, P, $NO_3$, $NO_2$, $NH_4$ | 76 – 90 |

Dieser Datensatz 2, freundlicherweise von der *Bundesanstalt für Gewässerkunde, Koblenz* zur Verfügung gestellt, wurde auch schon in *Schreiber, Krauß-Kalweit (1999)* verwendet, jedoch nur zum Vergleich von $F_M$ und $F_S$.

Hier werden nun in die Untersuchungen die „stetigkeitskorrigierten" Frachtschätzer 1 und 5 bis 7 einbezogen, die in Tab. 8 aufgelistet sind.

Tab. 8: „Stetigkeitskorrigierte" Frachtschätzer $\widehat{F}$

| Nr. | Frachtschätzer $\widehat{F}^{(\cdot)}$ | Modell |
|---|---|---|
| 1 | $F_S - \lvert J\rvert\overline{C}(\overline{Q}-\mu_Q)$ | |
| 5 | $F_S \cdot \dfrac{\mu_Q}{\overline{Q}}$ | $T(t) = Q(t)\beta + V(t)$ |
| 6 | $F_S - \lvert J\rvert(\overline{Q}-\mu_Q)\dfrac{s_{TQ}}{s_Q^2}$ | $T(t) = \alpha + Q(t)\beta + V(t)$ |
| 6a | $F_S - \lvert J\rvert(\overline{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{\mu}_y)' S_{yy}^{-1}\boldsymbol{s}_{yT}$ | $T(t) = \alpha + \boldsymbol{y}(t)'\boldsymbol{\beta} + V(t)$ |
| 7 | $F_S - \lvert J\rvert\big(\overline{C}(\overline{Q}-\mu_Q) + (s_Q^2 - \sigma_Q^2 + \mu_Q(\overline{Q}-\mu_Q))\dfrac{s_{CQ}}{s_Q^2}\big)$ | $C(t) = \alpha + Q(t)\beta + U(t)$ |
| 7a | $F_S - \lvert J\rvert\big(\overline{C}(\overline{Q}-\mu_Q) + (\boldsymbol{s}_{xQ} - \boldsymbol{\sigma}_{xQ} + \mu_Q(\overline{X}-\boldsymbol{\mu}_X))' S_{xx}^{-1}\boldsymbol{s}_{xC}\big)$ | $C(t) = \alpha + \boldsymbol{x}(t)'\boldsymbol{\beta} + U(t)$ |

(6a) $\boldsymbol{y}(t)' = \big(Q \;\; Q^2 \;\; \frac{1}{Q}\big)$ und (7a) $\boldsymbol{x}(t)' = \big(Q \;\; Q^2 \;\; \frac{1}{Q} \;\; \cos\frac{2\pi}{364}t \;\; \sin\frac{2\pi}{364}t\big)$

Für die Vergleichsrechnungen werden nur die übliche *14-Tages-Mischprobe* zur Bestimmung von $F_M$ und die *systematische 14-Tages-Stichprobe* zur Berechnung aller 14 möglichen $F_S$ ausgewählt, da die Diskussion über die Länge des Beprobungsintervalls bereits im Abschnitt 2 erfolgt ist.

Zusammenfassend sind die Schätzer 1, 5, 6 und 7 aus Tab. 8 bei Nichtberücksichtigung höherer Momente, also in erster Näherung besser als $F_S$, wenn gilt:

$$
\begin{array}{lrcl}
1 & \frac{\overline{\Sigma}_{QQ}}{\sigma_Q^2} & < & 2\frac{\overline{\Sigma}_{TQ}}{\mu_C \sigma_Q^2} \\
5 & \frac{\overline{\Sigma}_{QQ}}{\sigma_Q^2} & < & 2\frac{\overline{\Sigma}_{TQ}}{\frac{\mu_T}{\mu_Q} \sigma_Q^2} \\
6 & \frac{\overline{\Sigma}_{QQ}}{\sigma_Q^2} & < & 2\frac{\overline{\Sigma}_{TQ}}{\sigma_{TQ}} \\
7 & \frac{\overline{\Sigma}_{QQ}}{\sigma_Q^2} & < & 2\frac{\overline{\Sigma}_{TQ}}{\mu_C \sigma_Q^2 + \mu_Q \sigma_{CQ}}
\end{array}
$$

mit $\overline{\Sigma}_{TQ} \approx \mu_Q \overline{\Sigma}_{CQ} + \mu_C \overline{\Sigma}_{QQ}$ und analog $\sigma_{TQ} \approx \mu_Q \sigma_{CQ} + \mu_C \sigma_Q^2$. Die einzigen Unterschiede liegen bei dieser Darstellung im Nenner der rechten Seite. Nach diesen Angaben wäre der Schätzer mit kleinstem Nenner zu bevorzugen, weil dann am ehesten die betreffende Ungleichung erfüllt ist.

(1) Für größere positive $\sigma_{CQ}$ wird in der Regel Schätzer 1 gute Ergebnisse liefern, vgl. Ausführungen in Abschnitt 3.1.

(2) Bei $\sigma_{CQ} < 0$ wäre wegen $\mu_T = \mu_C \mu_Q + \sigma_{CQ}$ Schätzer 5 dem Schätzer 1 vorzuziehen, da wegen der größeren rechten Seite die Ungleichung eher erfüllt ist.

(3) Schätzer 6 ist dann empfehlenswert, wenn $C$ proportional zu $\frac{1}{Q}$, so dass das Absolutglied im Transport-Modell gerechtfertigt ist.

(4) Infolge der Approximation $\sigma_{TQ} \approx \mu_Q \sigma_{CQ} + \mu_C \sigma_Q^2$ scheinen Schätzer 6 und Schätzer 7 in etwa gleichwertig. Bei $\sigma_{CQ} < 0$ und $\mu_Q >> 0$ ist auch Schätzer 7 besser als Schätzer 1 anzusehen.

Diese Vergleiche sind jedoch nur Approximationen und müssen in der Praxis nicht zutreffen. Außerdem ist Vorsicht geboten, wenn die Maßzahlen im Wesentlichen durch einige extreme Werte geprägt werden, die dann auch die Stichproben stark beeinflussen.

Bezüglich der einzelnen Messreihen werden neben den Intervall-Mittelwerten $\mu_C$ und $\mu_T$ von Konzentration und Transport teilweise auch die einheitenlosen Kenngrößen

$$
\begin{array}{rcll}
\nu_X^2 & = & \frac{\sigma_X^2}{\mu_X^2} & \textit{Intervall-Variationskoeffizient} \\
\nu_{XY} & = & \frac{\sigma_{XY}}{\mu_X \mu_Y} & \textit{Intervall-Kovariationskoeffizient}
\end{array}
$$

von Interesse sein.

## 4.1 Beispielrechnungen mit Datensatz 1

Im Anhang A3 sind unter den Grafiken 6 und 7 die Zusammenhangsdiagramme der Konzentrationen sowie Transporte mit dem Abfluss $Q$ zu finden. Diese Grafiken werden üblicherweise zur Modellfindung herangezogen. Je besser die Kurve den Datenverlauf (zeitunabhängig) wiedergibt, desto geeigneter erscheint nach bisheriger Ansicht das Modell zur Frachtbestimmung. Die Theorie widerlegt jedoch diese Ansicht, weil nur der lineare Zusammenhang zwischen Konzentration und Abfluss für die Frachtberechnung und -modellierung wesentlich ist (siehe Abschnitt Lineare inhomogene Konzentrations-Modelle und Anhang A6). Diese Regressionsgeraden sind in die Bilder mit eingezeichnet.

Die Ergebnisse der Frachtberechnungen nach den Methoden 1, 7, 7a und 5, 6, 6a sind im Anhang A3 in den Grafiken 8 und 9 veranschaulicht. Zu Vergleichszwecken enthalten die Grafiken zusätzlich die Werte $F$, $F_M$ und $M$ sowie die 14 verschiedenen Schätzwerte $F_S$ aus den Grafiken 4.

Die Problematik der nur auf bessere Datenanpassung ausgerichteten Frachtschätzer ohne sachlogische Begründung zeigt sich in den Bildern an den erweiterten Modellschätzern 6a und insbesondere 7a, die durchgängig schlecht sind. Besser sind im Allgemeinen Frachtschätzer nach einem einfachen Modell.

Die nach den Grafiken 8 und 9 im Anhang A3 jeweils besten Frachtschätzer sind in der Tabelle 9 aufgelistet. Zusätzlich sind die rechten Nenner der obigen MSE-Vergleiche angegeben, die sich aus den Maßzahlen der Tabellen 10 und 11 ergeben. Ein kleiner Wert eines Nenners deutet darauf hin, dass am ehesten die betreffende Ungleichung erfüllt und somit der Schätzer zu bevorzugen ist, vorausgesetzt, diese Näherung ist brauchbar.

Tab. 9: Jeweils bester Frachtschätzer für C1 bis C7 mit den obigen MSE-Vergleichswerten (Nenner der rechten Seiten)

| $\widehat{F}$ | bester Schätzer | 1 $\mu_C\sigma_Q^2$ | 5 $\frac{\mu_T}{\mu_Q}\sigma_Q^2$ | 6 $\sigma_{TQ}$ | 7 $\mu_C\sigma_Q^2 + \mu_Q\sigma_{CQ}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| C1 | 6 | 392 | 335 | <u>229</u> | 339 |
| C2 | 5,(6) | 100 | 109 | 123 | 108 |
| C3 | 5 | 12,0 | 9,4 | 6,1 | 9,6 |
| C4 | 7 | 63 | 99 | 189 | 96 |
| C5 | $F_S$,(6) | 168 | 85 | <u>9,2</u> | 92 |
| C6 | – | 0,5 | 0,6 | 0,4 | 0,6 |
| C7 | 6 | 47 | 44 | <u>40</u> | 44 |

Die Ergebnisse können im Einzelnen wie folgt kommentiert und auch teilweise mit Hilfe der Modelltheorie erklärt werden:

C1, $\widehat{F}^{(6)}$: Im Zusammenhangsdiagramm der Grafik 6 ist die inverse Beziehung von $C1$ und $Q$ erkennbar ($\sigma_{CQ} < 0$), vgl. obige Eigenschaft (3), und Schätzer 6 hat den kleinsten Nennerwert. Außerdem ist Schätzer 6 erheblich besser als $F_S$ und auch etwas besser als $F_M$.

C2, $\widehat{F}^{(5)}$: Schätzer 5 (und auch Schätzer 6) zeigen eine deutliche Verbesserung gegenüber dem Schätzer $F_S$.

C3, $\widehat{F}^{(5)}$: C3 ist mit Q deutlich negativ korreliert, vgl. obige Eigenschaft (2) und Schätzer 5 ist erheblich besser als $F_S$.

C4, $\widehat{F}^{(7)}$: Schätzer 7 ist am besten, jedoch ist der Effizienzgewinn nicht so deutlich wie zuvor.

C5 und C6: Die Ganglinien weisen sehr viele Spitzen auf und sind wenig mit dem Abfluss $Q$ intervall-korreliert. Das scheint der Grund dafür zu sein, dass die modellbasierten Schätzer ganz überwiegend (und teilweise deutlich) schlechter sind als der Stichproben-Schätzer $F_S$, zumal bei C5 hinzukommt, dass dort ein größerer Bereich (konstant) interpoliert ist.

C7, $\widehat{F}^{(6)}$: Im Zusammenhangsdiagramm der Grafik 6 ist die inverse Beziehung von $C1$ und $Q$ erkennbar ($\sigma_{CQ} < 0$), vgl. obige Eigenschaft (3), und Schätzer 6 hat den kleinsten Nennerwert. Außerdem ist Schätzer 6 erheblich besser als $F_S$ und vergleichbar mit der Güte von $F_M$.

Tab. 10: Intervall-Mittelwerte $\mu_X$, -Varianzen $\sigma_X^2$, -Kovarianzen $\sigma_{XQ}$ und -Korrelationen $\rho_{XQ} = \frac{\sigma_{XQ}}{\sigma_X \sigma_Q}$ der Messgrößen C1 bis C7 und des Abflusses Q

| X | Q | C1 | C2 | C3 | C4 | C5 | C6 | C7 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\mu_X$ | 93,98 | 40,73 | 10,38 | 1,249 | 6,570 | 17,39 | 0,0504 | 4,901 |
| $\sigma_X^2$ | 9634 | 69,02 | 3,413 | 0,3017 | 36,09 | 650,8 | 0,00653 | 0,6718 |
| $\sigma_{XQ}$ | 9634 | -564,5 | 85,07 | -25,36 | 352,2 | -803,0 | 0,8266 | -33,01 |
| $\rho_{XQ}$ | 1,000 | -0,692 | 0,469 | -0,470 | 0,597 | -0,321 | 0,104 | -0,410 |

Tab. 11: Intervall-Mittelwerte $\mu_Y$, -Varianzen $\sigma_Y^2$, -Kovarianzen $\sigma_{YQ}$ und -Korrelationen $\rho_{YQ} = \frac{\sigma_{YQ}}{\sigma_Y \sigma_Q}$ der Transporte T1 bis T7 und des Abflusses Q

| Y | Q | T1 | T2 | T3 | T4 | T5 | T6 | T7 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\mu_Y$ | 93,98 | 3265 | 1060 | 92,05 | 968,7 | 833,1 | 5,564 | 427,6 |
| $\frac{\sigma_Y^2}{1000}$ | 9,634 | 5869 | 1599 | 4,841 | 6500 | 549,7 | 0,095 | 169,3 |
| $\frac{\sigma_{YQ}}{1000}$ | 9,634 | 229,3 | 123,4 | 6,097 | 189,0 | 9,218 | 0,411 | 39,81 |
| $\rho_{YQ}$ | 1,000 | 0,964 | 0,994 | 0,893 | 0,755 | 0,127 | 0,429 | 0,986 |

**Zusammenfassung** In fast allen Fällen ist ein geeigneter (Modell-)Schätzer mit Stetigkeitskorrektur besser als der Stichprobenschätzer $F_S$ und teilweise vergleichbar mit der Güte des Mischprobenschätzers $F_M$.

## 4.2 Beispielrechnungen mit Datensatz 2

Im Anhang A4 sind unter den Grafiken 10.Nr die Jahres-Ganglinien folgender Messgrößen (Tagesmittelwerte und in einem Fall Tagesmischproben) dargestellt, aufgelistet in Tabelle 12.

Tab. 12: Messgrößen (Tageswerte) nach Messstellen und Zeitraum

| Nr. | Messgröße | Messstelle | Zeitraum |
|---|---|---|---|
| 00a | Q | Bimmen, Rhein | 75 – 89 |
| 01 | CL Tagesmittelwerte | | 75 – 88 |
| 01a | LF als Modell-Einflussgröße | | 75 – 88 |
| 02 | $O_2$ | | 75 – 89 |
| 02a | Temperatur TP als Modell-Einflussgröße | | 76 – 85 |
| 03 | CL Tagesmischproben | | 76 – 87 |
| 03a | CL Vergleich Tagesmischproben und -mittelwerte | | 76 – 87 |
| 04 | $NO_3$ | | 76 – 87 |
| 05 | $NH_4$ | | 76 – 87 |
| 06 | $KMnO_4$ | | 76 – 87 |
| 07 | CSB | | 76 – 86 |
| 08 | BSB | | 76 – 84 |
| 09 | $NO_2$ | | 77 – 84 |
| 00b | Q | Mainz, Rhein | 78 – 89 |
| 10 | CL | | 82 – 89 |
| 10a | LF als Modell-Einflussgröße | | 82 – 89 |
| 11 | $NO_x$ | | 78 – 89 |
| 12 | $PO_4$ | | 78 – 89 |
| 13 | $O_2$ | | 78 – 89 |
| 00c | Q | Palzem, Mosel | 76 – 90 |
| 14 | CL | | 76 – 90 |
| 15 | P | | 76 – 90 |
| 16 | $NO_3$ | | 76 – 90 |
| 17 | $NO_2$ | | 76 – 90 |
| 17a | $NO_2$ | | 84 – 90 |
| 18 | $NH_4$ | | 76 – 90 |
| 18a | $NH_4$ | | 84 – 90 |

Von sämtlichen Datenreihen werden die Frachten nach den in Tabelle 8 aufgelisteten Stichproben-Schätzmethoden

$F^{(1)}$ und $F^{(7)}$: basierend auf linearen Konzentrations-Abfluss-Modellen,
$F^{(5)}$ und $F^{(6)}$: basierend auf linearen Transport-Abfluss-Modellen

ermittelt und zwar für alle möglichen 14 systematischen Stichproben und mit dem Stichprobenschätzer $F_S$ und dem 14-Tages-Mischprobenschätzer $F_M$ verglichen. Außerdem ist die Fracht $F$, berechnet aus allen 364 Daten, und die Mischfracht $M$, als Produkt der Mittelwerte von Konzentration und Abfluss, angegeben.

Charakteristiken und Besonderheiten in den Kurvenverläufen, die für die Frachtberechnung interessant sein könnten, sind nachstehend kommentiert:

### Bimmen, Rhein

| | | |
|---|---|---|
| 01 | CL | Teilweise deutlicher Wochengang |
| 01a | LF | Teilweise deutlicher Wochengang und gute Übereinstimmung mit CL |
| 02 | $O_2$ | Ein mehr oder weniger sichtbarer Jahresgang wird durch weitere Einflüsse stark überlagert. |
| 02a | TP | Die Temperatur zeigt einen deutlichen Jahresgang, überlagert duch geringe temporäre Einflüsse |
| 03 | CL(M) | Teilweise deutlicher Wochengang auch bei den Mischproben |
| 03a | CL(M) – CL | Nebenresultat: Die Verläufe von Tagesmischproben und Tagesmittelwerten weisen durchaus Unterschiede auf. Bei Werten, die im wesentlichen im Bereich 150 – 200 liegen (bei einer Spannweite von 50 – 400), treten Abweichungen um $\pm$ 50 auf. Somit sind Abweichungen von 20% und mehr keine Seltenheit und die Aussage deckt sich mit der aus der Literatur. Beim hier vorliegenden rein statistischen Fehlervergleich der Stichprobenstrategie mit der Mischprobenstrategie ist dieser Aspekt zusätzlich zu berücksichtigen. |
| 04 | $NO_3$ | Teilweise deutlicher Jahresgang |
| 05 | $NH_4$ | Insbesondere 1978, 1979 ausgeprägter Jahresgang |
| 06 | $KMnO_4$ | Hohe kurzfristige Dynamik um eine Konstante |
| 07 | CSB | Hohe kurzfristige Dynamik um eine Konstante |
| 08 | BSB | Hohe kurzfristige Dynamik, teilweise verbunden mit leichtem Jahresgang |
| 09 | $NO_2$ | Hohe kurzfistige und mittelfristige Dynamik |

### Mainz, Rhein

| | | |
|---|---|---|
| 10 | CL | Deutlicher Wochengang |
| 10a | LF | Deutlicher Wochengang und gute Übereinstimmung mit CL |
| 11 | $NO_x$ | Teilweise deutlicher Jahresgang |
| 12 | $PO_4$ | Hohe kurzfristige Dynamik |
| 13 | $O_2$ | Jahresgang erkennbar |

### Palzem, Mosel

| | | |
|---|---|---|
| 14 | CL | Kurz- bis mittelfristige Schwankungen |
| 15 | P | Kurz- bis mittelfristige Schwankungen |
| 16 | $NO_3$ | Hohe kurz- bis mittelfristige Dynamik |
| 17 | $NO_2$ | Kurz- bis mittelfristige Schwankungen |
| 17a | | Ab 1984 deutlich kleinere Werte |
| 18 | $NH_4$ | Kurz- bis mittelfristige Schwankungen |
| 18a | | Ab 1984 deutlich kleinere Werte |

Die Ergebnisse, die im einzelnen den zugehörigen Grafiken 11 und 12 im Anhang 4 entnommen werden können, sind nachfolgend aufgelistet:

**Bimmen, Rhein**

| | | |
|---|---|---|
| 01 | CL | $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(5)}$ (und zum Teil $\widehat{F}^{(7)}$) sind in den Jahren 1977, 1979, 1986 deutlich besser als $F_S$ und vergleichbar mit $F_M$. Ansonsten sind die Modell-Schätzer ähnlich wie $F_S$. Durch das systematische 14-tägige Abtasten überträgt sich der Wochengang auf die Schätzer. |
| 01a | CL : LF | Die weitere Modelleinflussgröße LF im linearen C-Q-Modell bringt eine deutliche Verbesserung in fast allen Jahren gegenüber $\widehat{F}^{(1)}$ bzw. $\widehat{F}^{(7)}$ und führt zu teilweise besserer Güte als $F_M$ (1981, 1983, 1984, 1986, 1987, 1988). Insbesondere verschwindet weitgehend die induzierte Periodik. Wegen negativer CQ-Korrelation (intern und extern) ist $F_M$ größer als $F$. |
| 02 | $O_2$ | $\widehat{F}^{(1)}$ ist durchgängig und $\widehat{F}^{(5)}$, $\widehat{F}^{(7)}$ sind teilweise besser als Schätzer $F_S$, der eine ausgeprägte Periode hat, durch einen 1-2-Wochengang in den Daten induziert. $F_M$ ist kaum verzerrt ($O_2$ und Q fast unkorreliert). |
| 02a | $O_2$ : TP | Die weitere Einflussgröße Temperatur TP zur Erfassung der Jahresschwankung bringt hier allenfalls 1980, 1982 eine Verbesserung, weil ansonsten die Jahresschwankung in $O_2$ wenig ausgeprägt und durch dominante Größen überlagert ist. Für z. B. 1977, 1985 ist der erweiterte Mdellschätzer viel schlechter als der einfache und unterstreicht die theoretisch abgeleitete Aussage, dass „größere" Modelle die Schätzgüte verschlechtern können. |
| 03 | CL(M) | Die Situation ist ähnlich wie in 01 CL. |
| 04 | $NO_3$ | $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(5)}$ und $\widehat{F}^{(7)}$ sind in fast allen Jahren präziser als $F_S$. $F^{(6)}$ ist nur 1984 in vergleichbarer Güte wie die anderen Modell-Schätzer. $F_M$ ist kaum verzerrt, da die Datenreihe mit $Q$ kaum korreliert ist. |
| 05 | $NH_4$ | Die modellbasierten Schätzer zeigen keine Verbesserung gegenüber $F_S$. $\widehat{F}^{(6)}$ ist sogar durchgehend schlecht und deshalb in die Bilder nicht eingetragen, wieder ein Beleg dafür, dass selbst eine Modellerweiterung um ein Absolutglied (in den Transporten) die Schätzgüte verschlechtern kann. |
| 06 | $KMnO_4$ | In der Hälfte der Jahre sind $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(5)}$ und $\widehat{F}^{(7)}$ etwas besser als $F_S$, aber mit deutlich höherem MSE als $F_M$. $\widehat{F}^{(6)}$ ist nur 1982, 1986 in vergleichbarer Güte wie die anderen Modell-Schätzer. |
| 07 | CSB | $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(5)}$ sind vergleichbar und nur 1977 deutlich besser als $F_S$, ansonsten nützt die Stetigkeitskorrektur nichts. $F_M$ ist gering verzerrt. |
| 08 | BSB | Keine nennenswerte Verbesserung von $F_S$ durch modellbasierte Schätzer erkennbar. Auch hier ist $\widehat{F}^{(6)}$ schlecht und deshalb nicht eingetragen. $F_M$ ist gering verzerrt. |
| 09 | $NO_2$ | Nur 1977 sind $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(5)}$ klar besser als $F_S$. $\widehat{F}^{(6)}$ ist wiederum schlecht. $F_M$ überschätzt $F$, besonders in 1979, 1983, 1984. Der MSE ist dennoch kleiner als bei den Stichprobenschätzern. |

## Mainz, Rhein

| | | |
|---|---|---|
| 10 | CL | Alle Stichprobenschätzer zeigen kaum Unterschiede. Der deutliche Wochengang in den Daten überträgt sich konstruktionsgemäß auf die Schätzer. Die Berücksichtigung einer Wochenschwingung in den Modellen wäre hier sinnvoll (10a). Der MSE für $F_M$ ist deutlich kleiner als der von $F_S$. |
| 10a | CL : LF | Mit Berücksichtigung der Leitfähigkeit LF als Einflussgröße wird der Schätzfehler (MSE) erheblich reduziert und ist dann vergleichbar mit $F_M$. |
| 11 | $NO_x$ | In der Mehrzahl der Jahre sind $\widehat{F}^{(1)}$ (teilweise vergleichbar mit $\widehat{F}^{(7)}$) und $\widehat{F}^{(5)}$ besser als $F_S$. $\widehat{F}^{(6)}$ erweist sich auch hier schlechter als die übrigen Modell-Schätzer und zum Teil auch schlechter als $F_S$ und ist daher nicht eingetragen. $F_M$ ist kaum verzerrt. |
| 12 | $PO_4$ | $\widehat{F}^{(6)}$ ist deutlich schlechter als $F_S$ und daher nicht berücksichtigt. Ansonsten sind die Schätzer vergleichbar mit $F_S$. $F_M$ ist leicht verzerrt, am meisten in 1980. |
| 13 | $O_2$ | Für $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(5)}$ und teilweise $\widehat{F}^{(7)}$ ist die Schätzgüte deutlich besser als von $F_S$ und mit der Güte von $F_M$ vergleichbar (1978, 1981). $\widehat{F}^{(6)}$ ist auch hier schlecht und weggelassen. |

## Palzem, Mosel

| | | |
|---|---|---|
| 14 | CL | In einigen Jahren (1977, 1981, 1985) ist $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(5)}$ und zum Teil $\widehat{F}^{(7)}$ deutlich besser als $F_S$. Teilweise ist $F_M$ erheblich größer als $F$ (1978, 1979, 1984, 1986, 1988, 1990), bedingt durch die hohe negative (interne) Korrelation mit $Q$. $\widehat{F}^{(6)}$ ist 1989, 1990 von allen Stichprobenschätzern am besten, weil dort CL proportional zu 1/Q und daher das Absolutglied im Transport-Modell sachlich gerechtfertigt ist. |
| 15 | P | In etwa der Hälfte der Jahre (1976, 1978, 1979, 1981, 1987, 1988) sind $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(5)}$ (und zum Teil $\widehat{F}^{(7)}$) besser als $F_S$. $\widehat{F}^{(6)}$ ist sehr schlecht und deshalb nicht berücksichtigt. $F_M$ ist nur gering verzerrt. |
| 16 | $NO_3$ | $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(5)}$ (und zum Teil $\widehat{F}^{(7)}$) sind vergleichbar und in etwa der Hälfte der Jahre (1977–1980, 1985–1990) deutlich besser als $F_S$ und erreichen 1982 die Güte von $F_M$. $\widehat{F}^{(6)}$ ist sehr schlecht und deshalb nicht berücksichtigt. |
| 17 | $NO_2$ | Nur in wenigen Jahren (1977, 1979, 1982) sind $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(5)}$ (und zum Teil $\widehat{F}^{(7)}$) besser als $F_S$. Ansonsten bringen die Modell-Schätzer keine Verbesserung gegenüber $F_S$. $F_M$ ist in einigen Zeiträumen leicht verzerrt. $\widehat{F}^{(6)}$ ist auch hier sehr schlecht und deshalb nicht berücksichtigt. |
| 18 | $NH_4$ | Nur in 1978 bringen $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(5)}$ eine klare Verbesserung von $F_S$ und ansonsten (wie auch $\widehat{F}^{(7)}$) eher noch eine Verschlechterung. $F_M$ überschätzt teilweise $F$ deutlich (1988, 1990) und wird nur dort in etwa vergleichbar mit $F_S$. $\widehat{F}^{(6)}$ ist auch hier sehr schlecht und deshalb nicht berücksichtigt. |

## 4.3 Zusammenfassung der Ergebnisse

Im Kapitel 3 wurden die modellbasierten Frachtschätzer (lineare Transport- und lineare Konzentrations-Modelle) und ihre Eigenschaften theoretisch diskutiert. Ein bemerkenswertes Resultat war, dass in einem theoretischen linearen Konzentrations-Modell neben der Abflussgröße $Q$ weitere Einflussgrößen nicht benötigt werden (auch nicht $1/Q$, $Q^2$, usw.), weil ihr Frachtbeitrag Null ist. Bereits bei der Diskussion der Verzerrung des Mischprobenschätzers $F_M$ bezüglich der Fracht $F$ zeigte sich, dass hierbei auch nur der lineare Zusammenhang zwischen Konzentration $C$ und Abfluss $Q$ relevant ist. Andere Zusammenhänge spielten dabei ebenfalls keine Rolle. Im analogen empirischen Modell führten die Einflussgrößen zu „Stetigkeitskorrekturen“ im einfachen Stichprobenschätzer $F_S$, und zwar über den Vergleich von den theoretischen und den auf der Stichprobe basierenden Intervall-Mittelwerten, -Varianzen und -Kovarianzen.

Die Theorie zeigte auch, dass zwar die Modelle bei Hinzunahme weiterer Einflussgrößen die Konzentrationsdaten empirisch besser anpassen, jedoch unter mathematisch-statistischen Gesichtspunkten der mittlere quadratische Fehler (MSE) schlechter werden kann. Deshalb sollte „sparsam“ (bzw. sorgsam) mit der Wahl der Einflussgrößen umgegangen werden (Parsimonitätsprinzip). Es ist besser, nur die wesentlichen Einflussgrößen im Modell zu berücksichtigen, als viele unwichtige hinzuzunehmen. Damit würde zwar die Varianz der Restgröße leicht verringert, die Schätzunsicherheiten in den Koeffizienten und damit in der Frachtschätzung wären hingegen deutlich höher.

Die empirischen Untersuchungen sollten Hinweise geben, in welcher Situation welcher Schätzer am besten ist oder anders gesagt, wann ein Schätzer schlecht abschneidet. In die Untersuchungen wurden die Schätzer

$\widehat{F}^{(1)}$ und $\widehat{F}^{(7)}$: Konzentrations-Abfluss-Modelle[3]

$\widehat{F}^{(5)}$ und $\widehat{F}^{(6)}$: Transport-Abfluss-Modelle

einbezogen. In den Schätzern $\widehat{F}^{(1)}$ und $\widehat{F}^{(5)}$ erfolgt eine Stetigkeitskorrektur nur über den Vergleich vom Stichprobenmittelwert $\overline{Q}$ mit dem theoretischen Intervall-Mittelwert $\mu_Q$. In den Schätzern $\widehat{F}^{(6)}$ und $\widehat{F}^{(7)}$ werden zusätzlich Vergleiche von theoretischen und empirischen Intervall-Varianzen und -Kovarianzen herangezogen.

Der Schätzer $\widehat{F}^{(6)}$ basiert auf einem linearen inhomogenen Transport-Abfluss-Modell, also auf $T(t) = \alpha + Q(t)\beta + U(t)$, was im analogen Konzentrations-Modell zur Einflussgröße $1/Q(t)$ führt, d.h. $C$ sollte in diesem Falle im wesentlichen umgekehrt proportionl zu $Q$ sein.

Die empirischen Untersuchungen bestätigen die folgenden Aussagen:

- Der Schätzer $\widehat{F}^{(6)}$ ist nur dann empfehlenswert, wenn die Konzentration $C$ ganz deutlich umgekehrt proportional zum Abfluss $Q$ ist. Beispiele sind C1 und C7 aus Datensatz 1 und 14 CL aus Datensatz 2. Andernfalls kann dieser Schätzer sehr schlechte Ergebnisse liefern.

[3] Der Schätzer 1 kann als Momentenschätzer in einem solchen Modell angesehen werden.

- Fast immer besser als der einfache Stichprobenschätzer $F_S$ ist ein geeigneter modellbasierter und damit $F_S$–stetigkeitskorrigierender Schätzer.

- Die Hinzunahme weiterer nicht wesentlicher Einflussgrößen verschlechtert teilweise erheblich die Güte der Modell-Frachtschätzer. Nur sachlich begründete Einflussgrößen, die meist auch die Zeit $t$ explizit enthalten, wie etwa ähnlich verlaufende Messreihen oder sinus-cosinus-Funktionen zur Erfassung periodischer Einflüsse sind geeignet. Modelle, die sich lediglich an einer „guten" Datenanpassung der Konzentrationswerte vermöge einer mehrparametrigen Funktion $f(Q, \beta)$ (oft in Verbindung mit der e-Funktion) orientieren, sind mit Vorsicht zu beurteilen.

- Eine einfache Korrektur, additiv wie in $\widehat{F}^{(1)}$ der multiplikativ wie in $\widehat{F}^{(5)}$ führt oft zu besseren Ergebnissen. Weitere Korrekturen durch Vergleiche von Intervall-Varianz und -Kovarianz wie in $\widehat{F}^{(7)}$ sind dann angebracht, wenn die Konzentrationsganglinie nicht zu viele extreme Spitzen aufweist, die dann in den Varianz- und Kovarianztermen zu Überkorrekturen führen, vgl. dazu die Beispiele aus Datensatz 2.

- Mischprobenschätzer sind, rein mathematisch-statistisch gesehen, immer dann gut, wenn die interne Kovarianz von $C$ und $Q$ klein ist. In diesem Fall fällt die Verzerrung (hier gleichbedeutend mit dem MSE) gering aus. In sehr vielen Beispielen aus dem Datensatz 2 ist das zutreffend. In einigen Situationen verbessert ein modellbasierter Schätzer den Stichprobenschätzer $F_S$, so dass die statistische Güte von $F_M$ erreicht wird, vgl. z. B. 13 $O_2$ und 16 $NO_3$.

# Anhang

## A1 Frachtberechnung bei Stunden- und Tagesmittelwerten mit Datensatz 1 aus Kapitel 4 zu Abschnitt 2.2.3 Beispielrechnungen

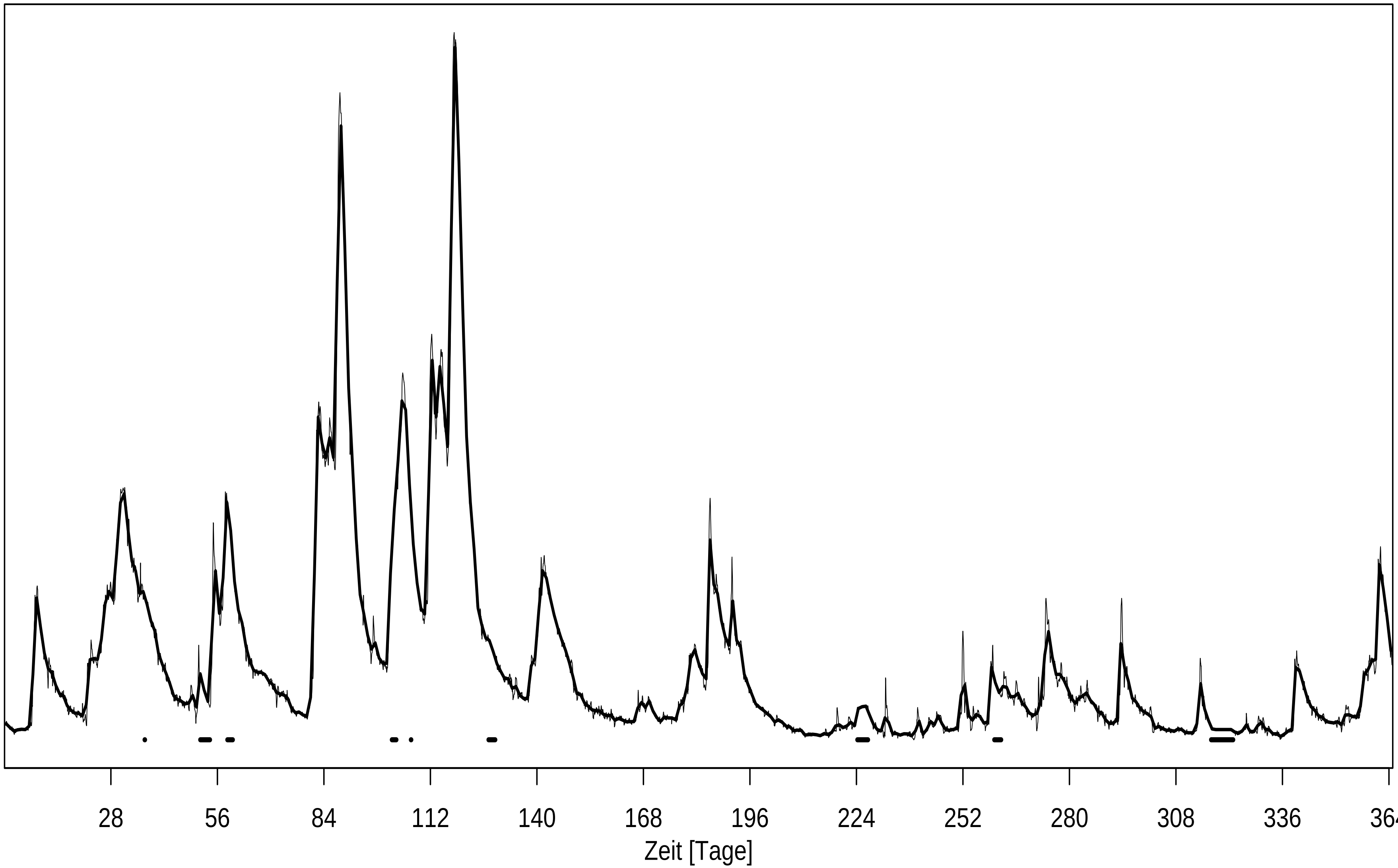
Grafiken 1:

Originaldaten der stündlichen Messungen (Stundenmittelwerten) von Abfluss $Q$ und Konzentrationen $C1$ bis $C7$ (unruhige Kurven), verglichen mit den Verläufen der Tagesmittelwerte (fehlende Werte in den gekennzeichneten Bereichen sind linear interpoliert)

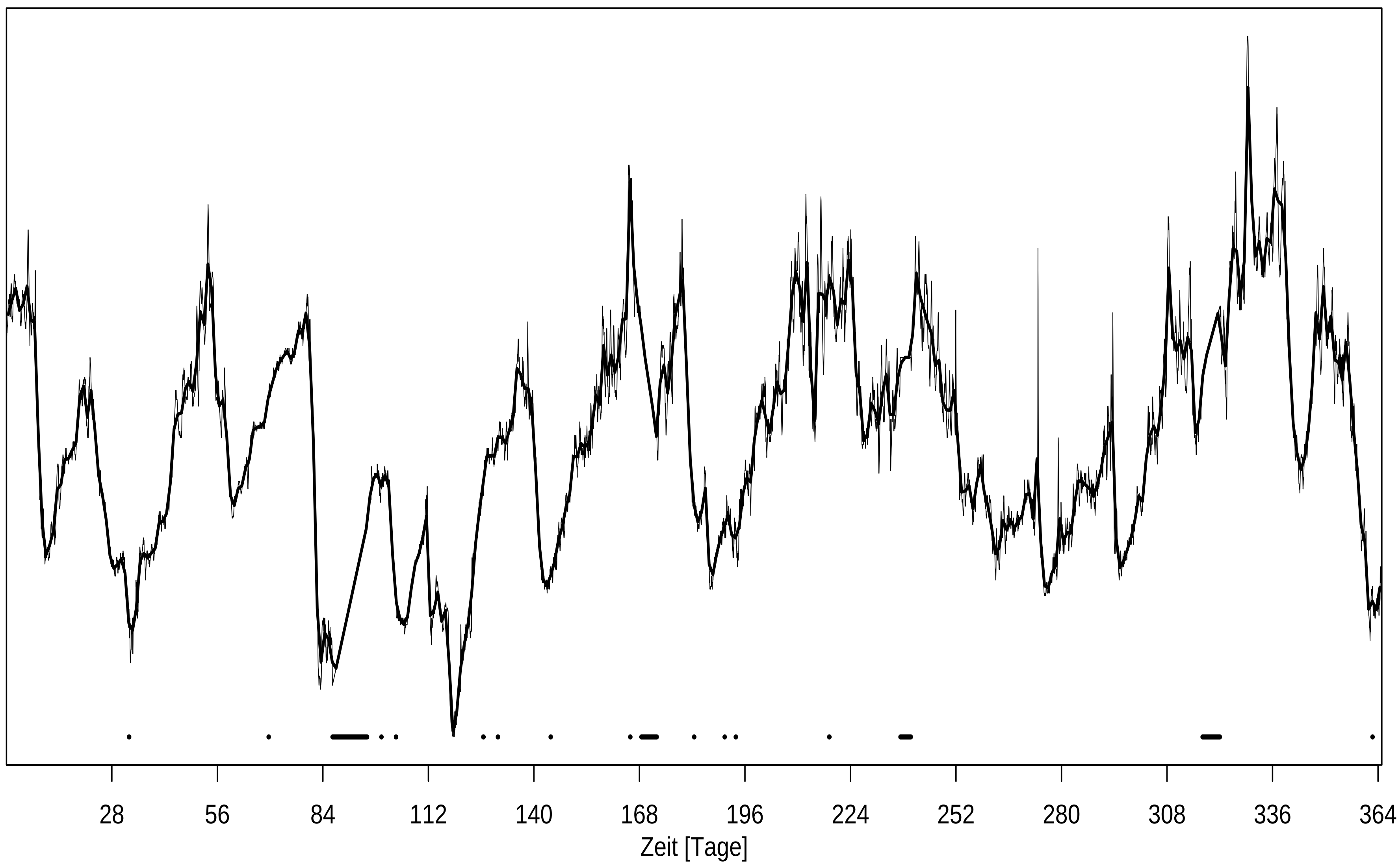
Grafiken 2:

Ganglinien der Tagesfrachten (oben) und Tagesmischprobenfrachten (unten) der Stoffe $C1$ bis $C7$

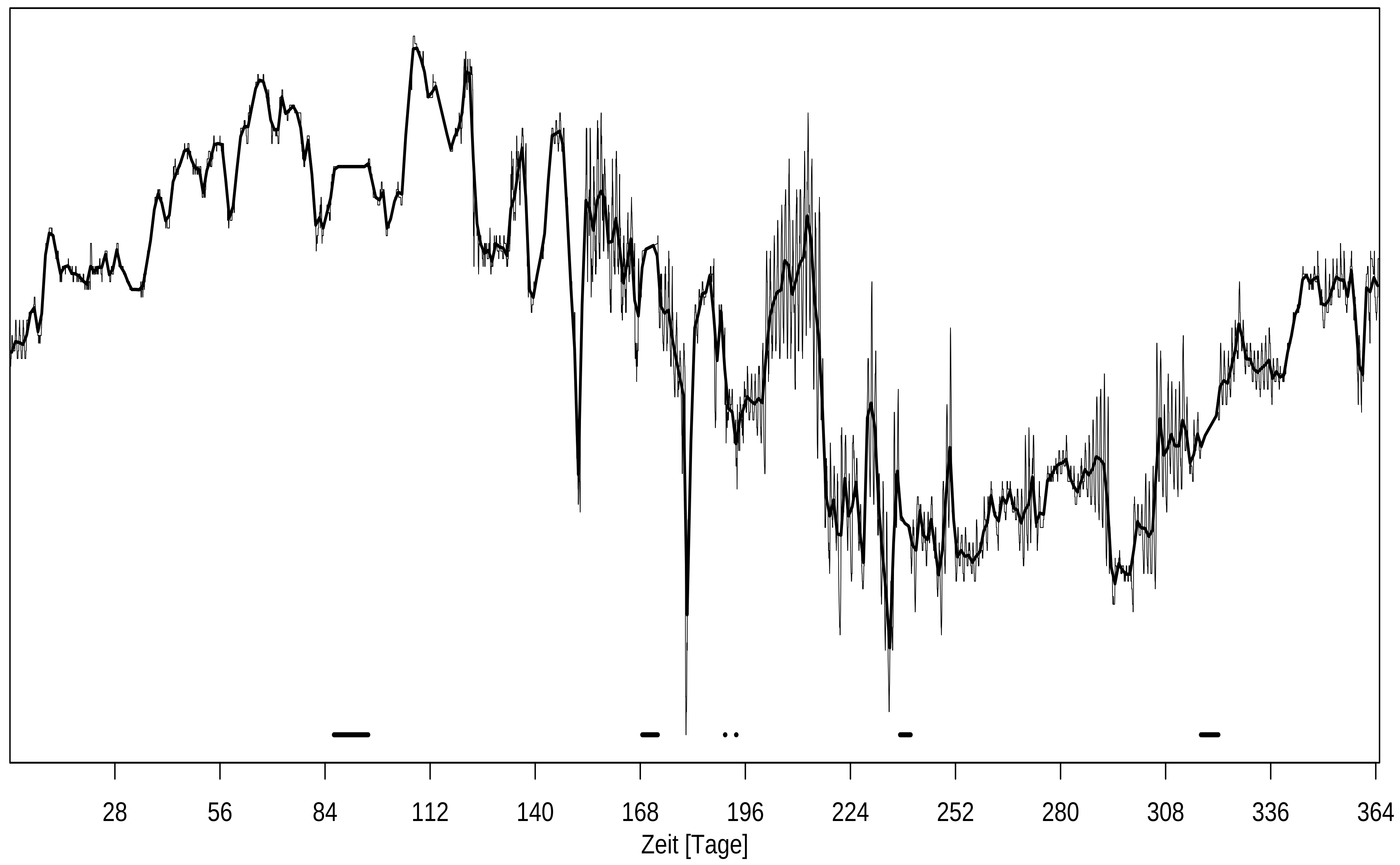
Grafik 1.0: Abfluss Q, Stunden- und Tagesmittelwerte (dickere Linie)



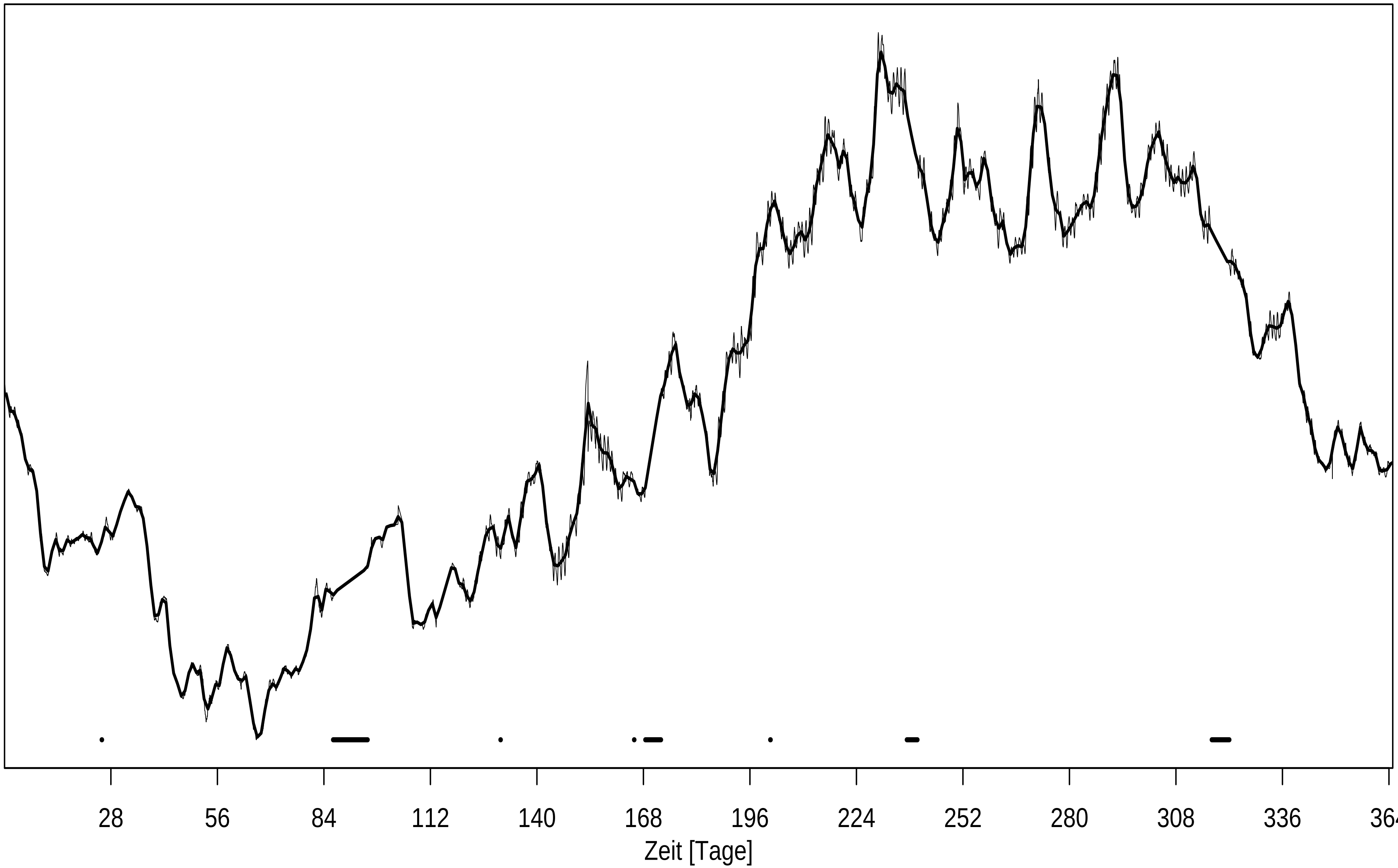
Grafik 1.1: Konzentration C1, Stunden- und Tagesmittelwerte (dickere Linie)



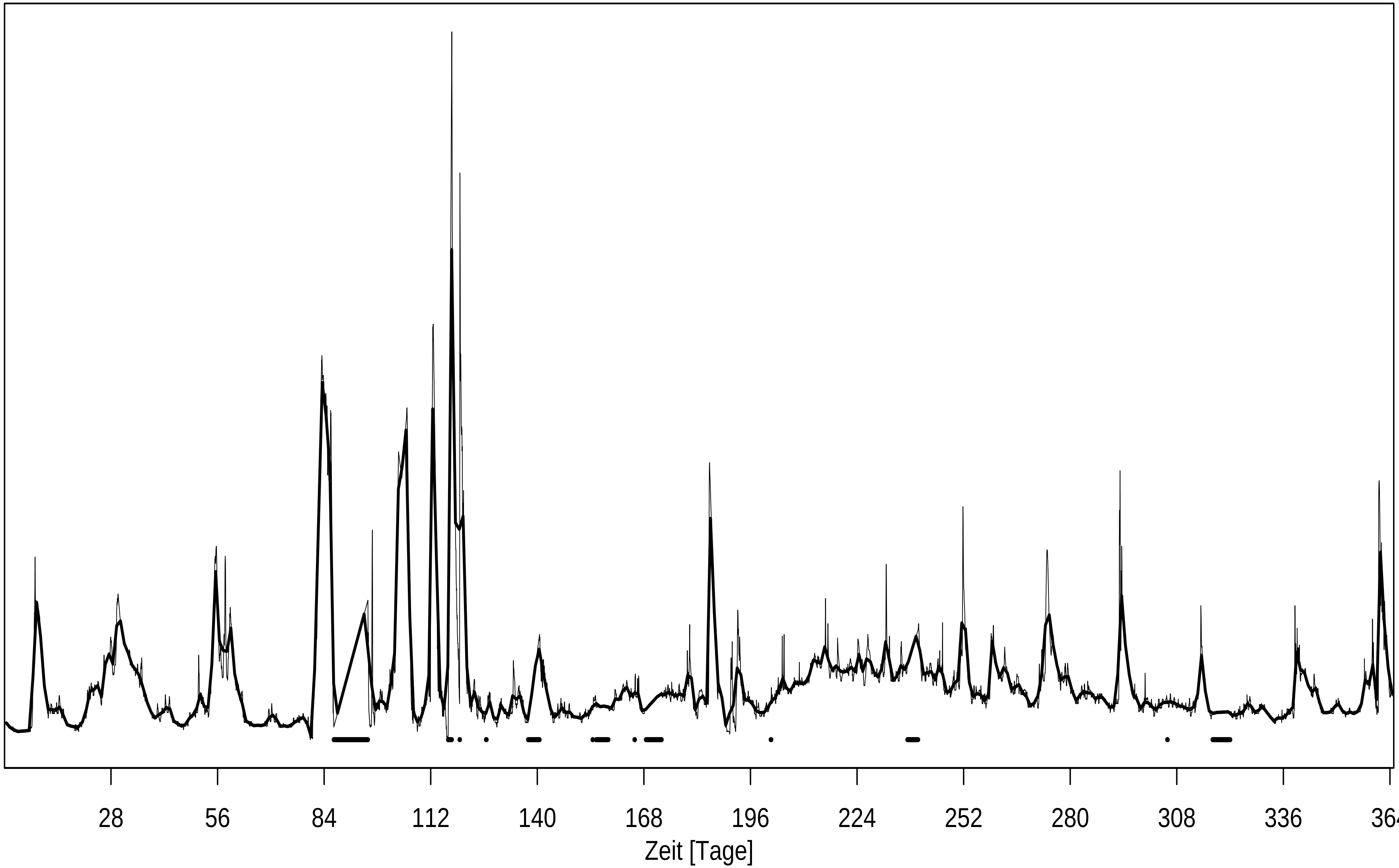
Grafik 1.2: Konzentration C2, Stunden- und Tagesmittelwerte (dickere Linie)



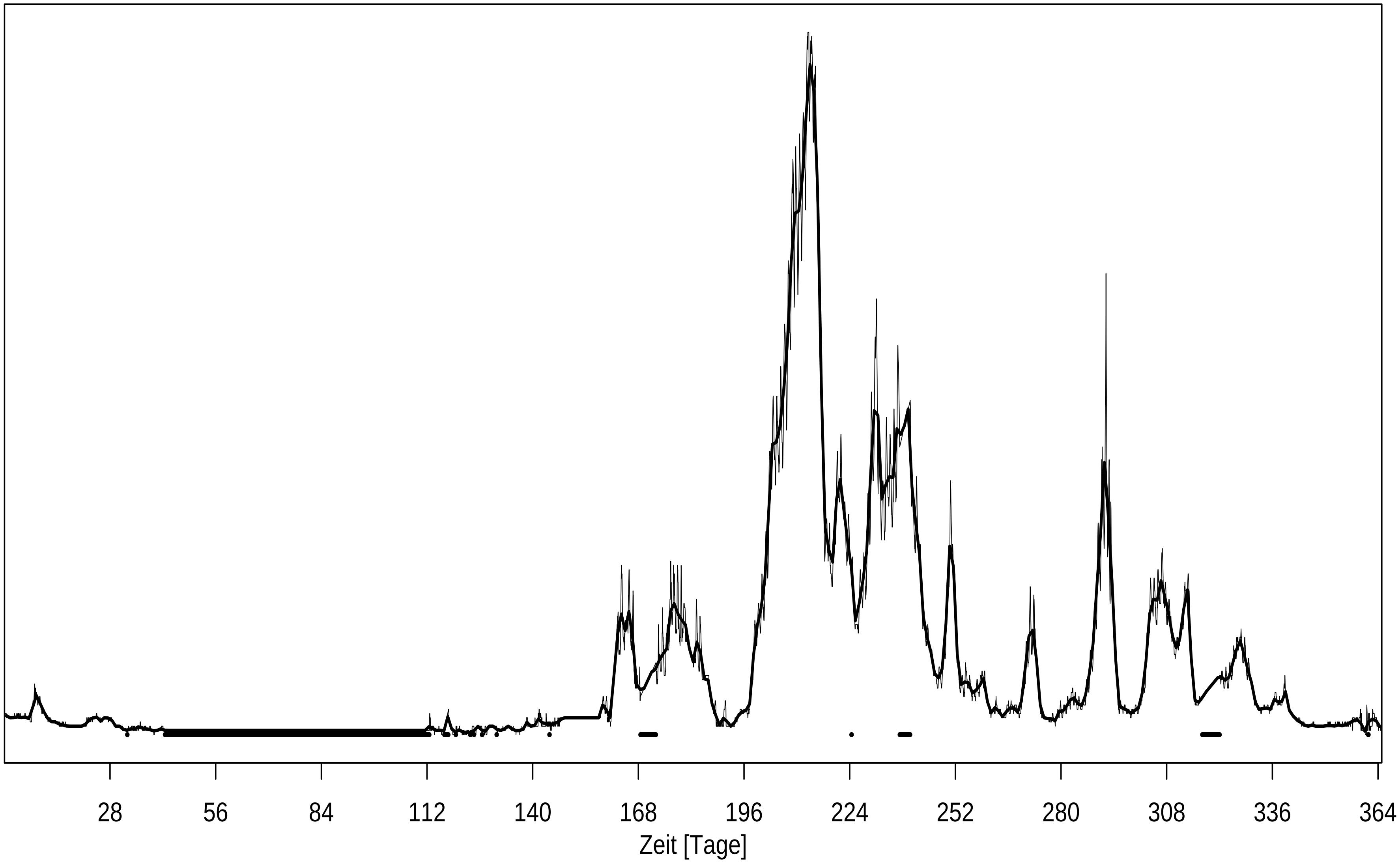
Grafik 1.3: Konzentration C3, Stunden- und Tagesmittelwerte (dickere Linie)



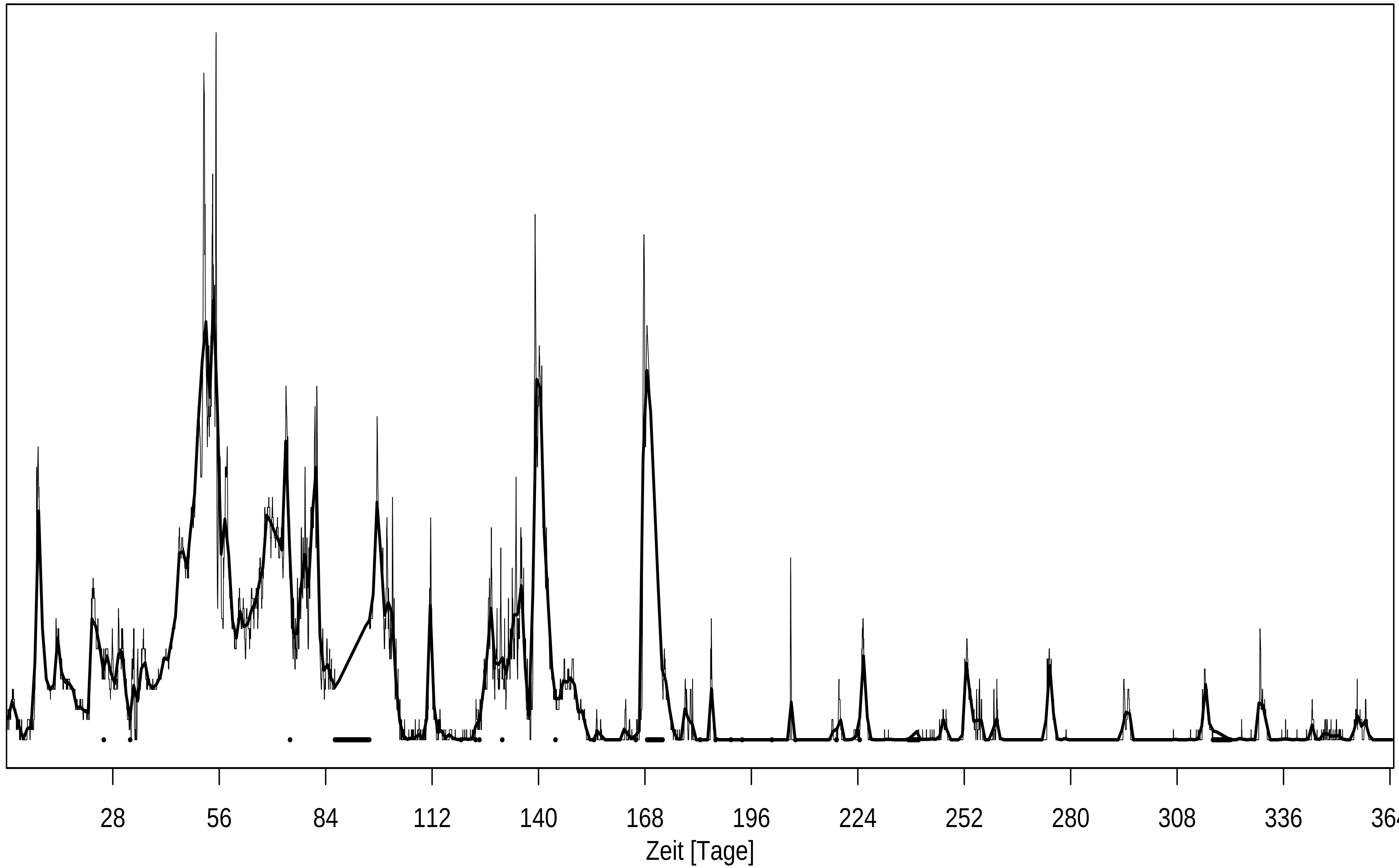
Grafik 1.4: Konzentration C4, Stunden- und Tagesmittelwerte (dickere Linie)



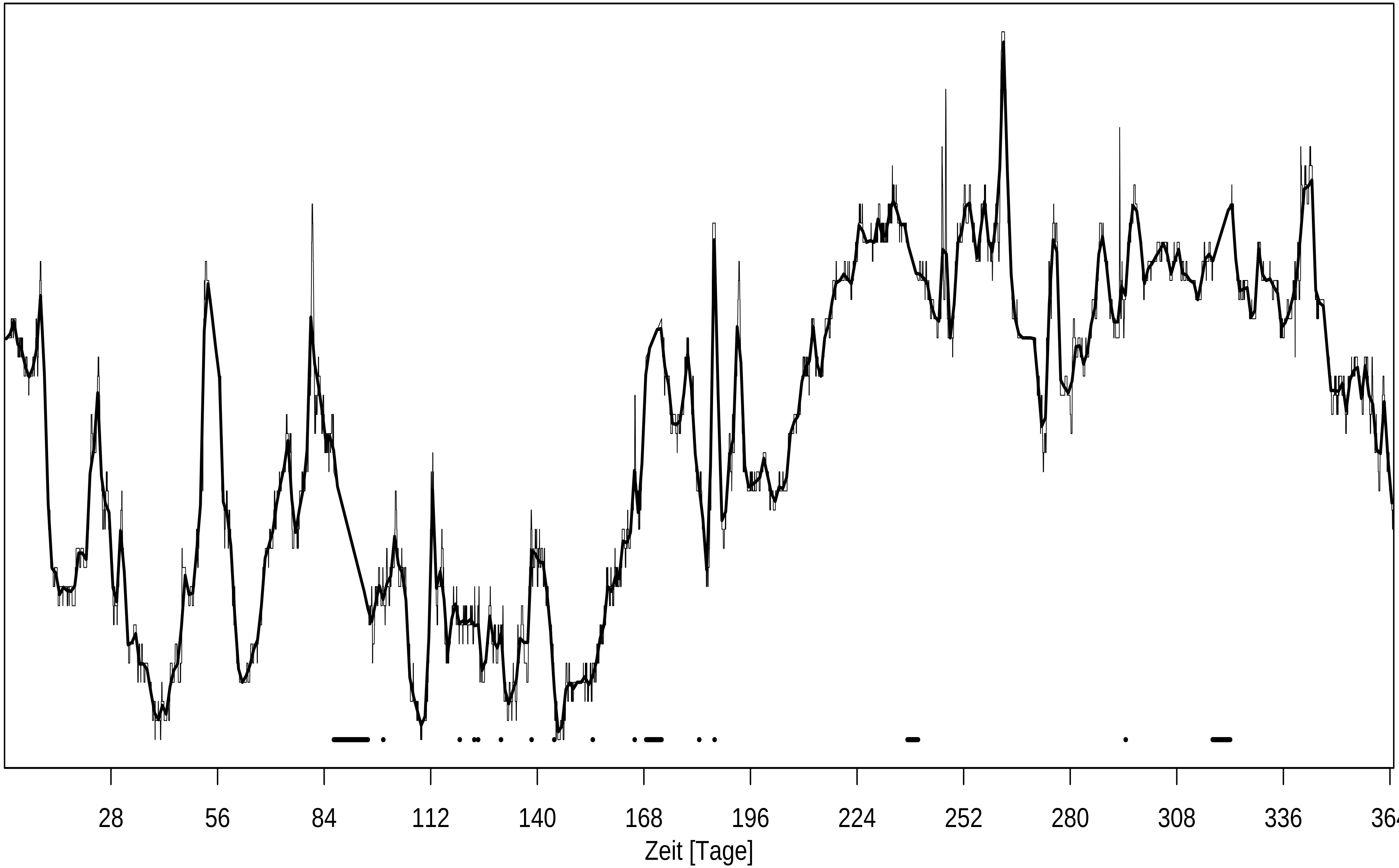
Grafik 1.5: Konzentration C5, Stunden- und Tagesmittelwerte (dickere Linie)



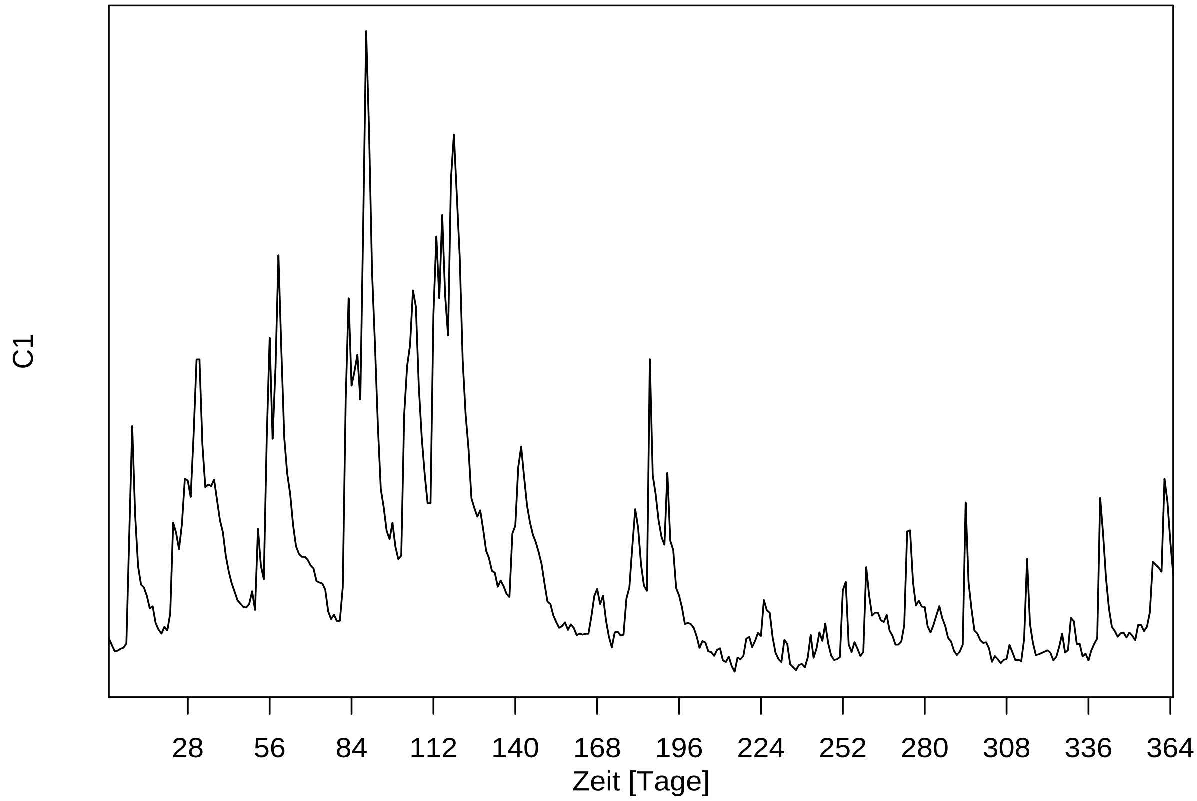
Grafik 1.6: Konzentration C6, Stunden- und Tagesmittelwerte (dickere Linie)

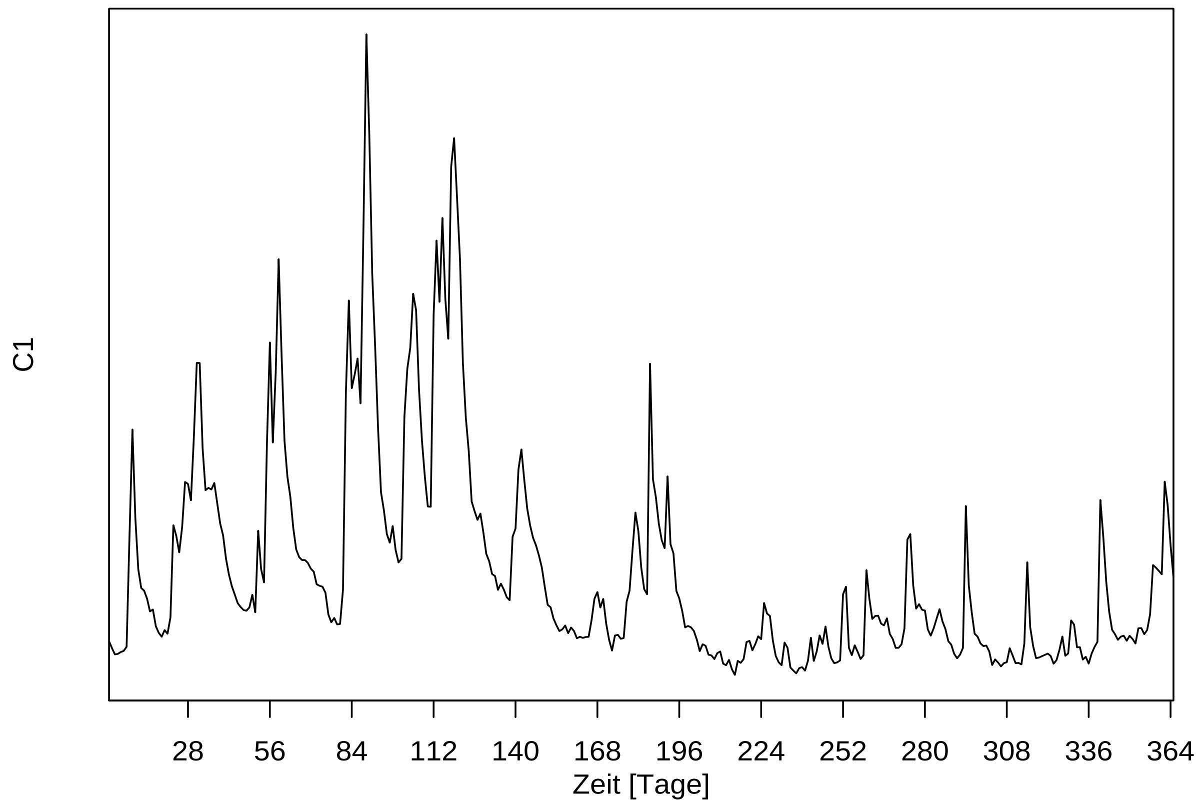


Grafik 1.7: Konzentration C7, Stunden- und Tagesmittelwerte (dickere Linie)

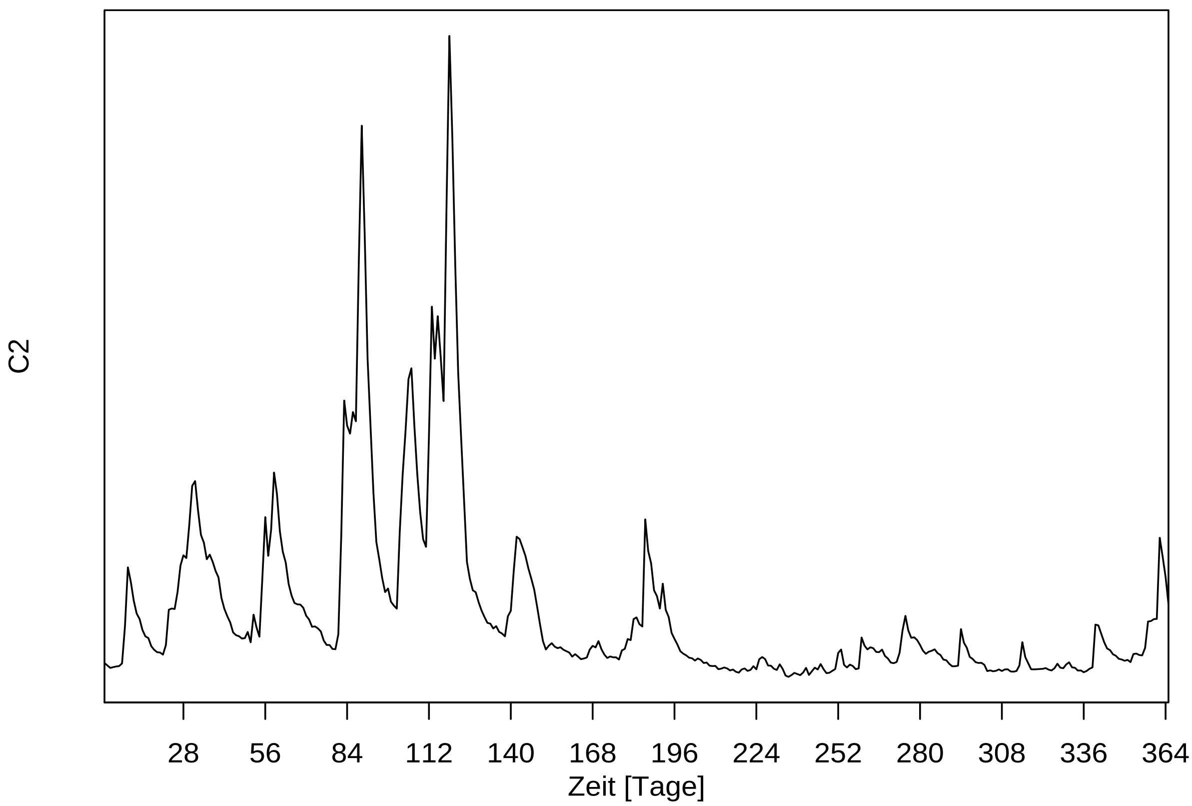


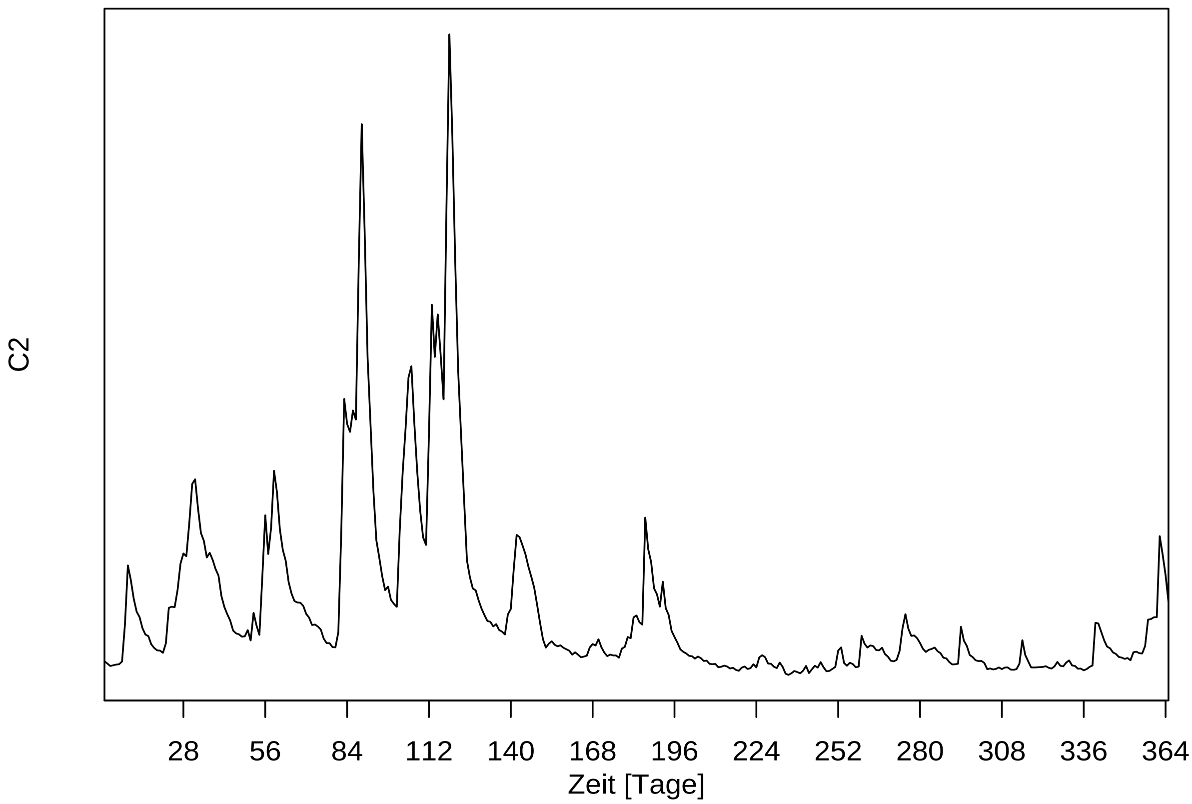
Grafik 2.1: C1 Tagesfrachten (oben), Tagesmischprobenfrachten (unten)



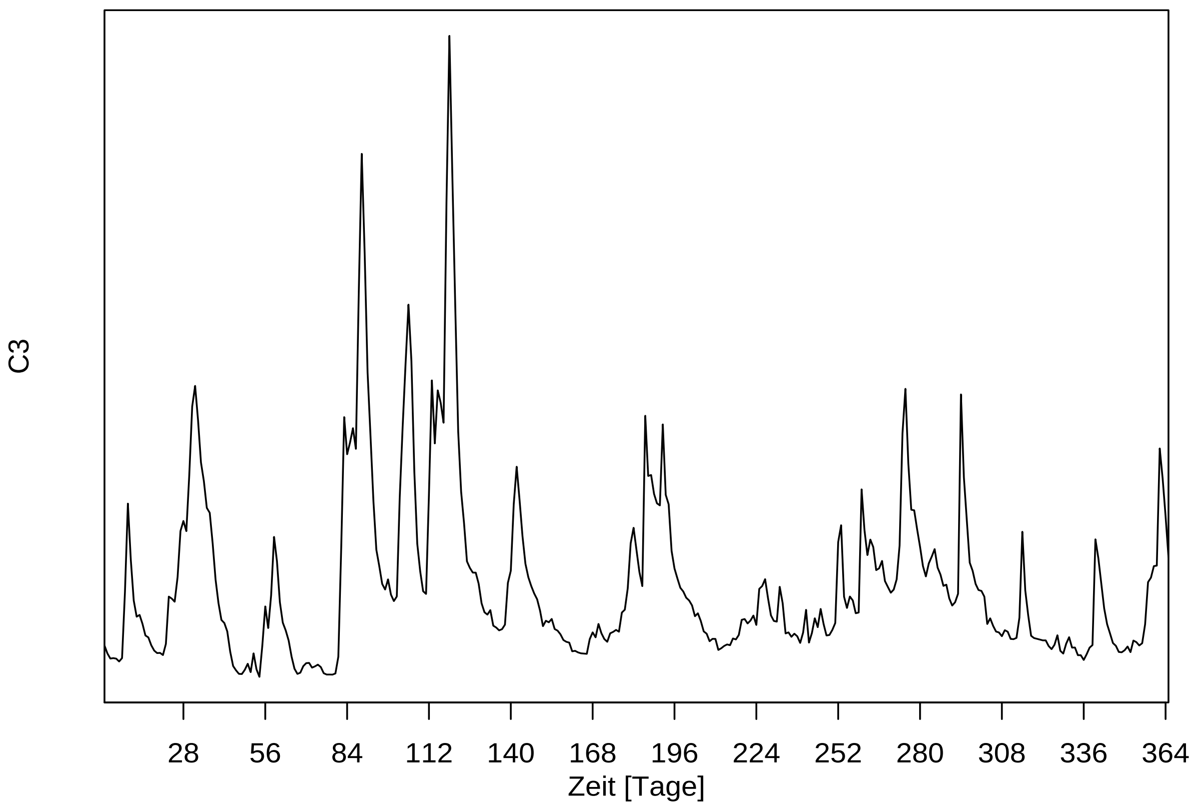



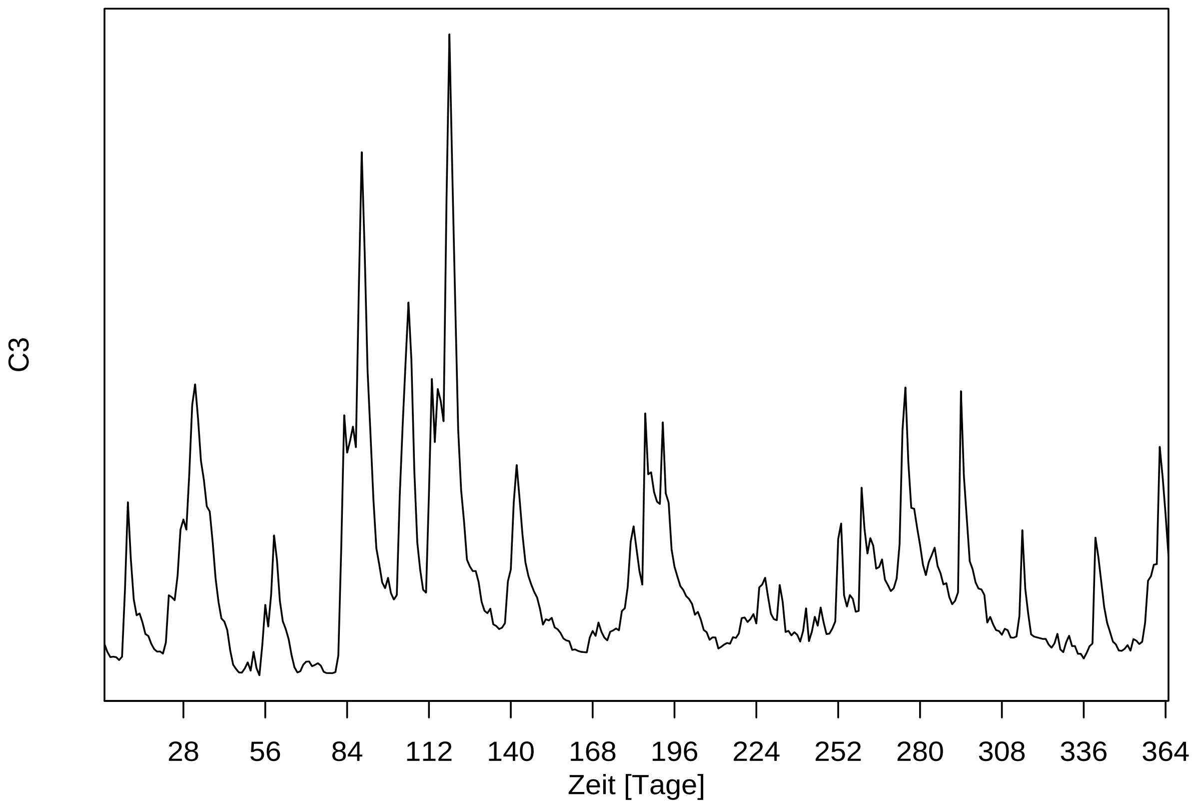
Grafik 2.2: C2 Tagesfrachten (oben), Tagesmischprobenfrachten (unten)



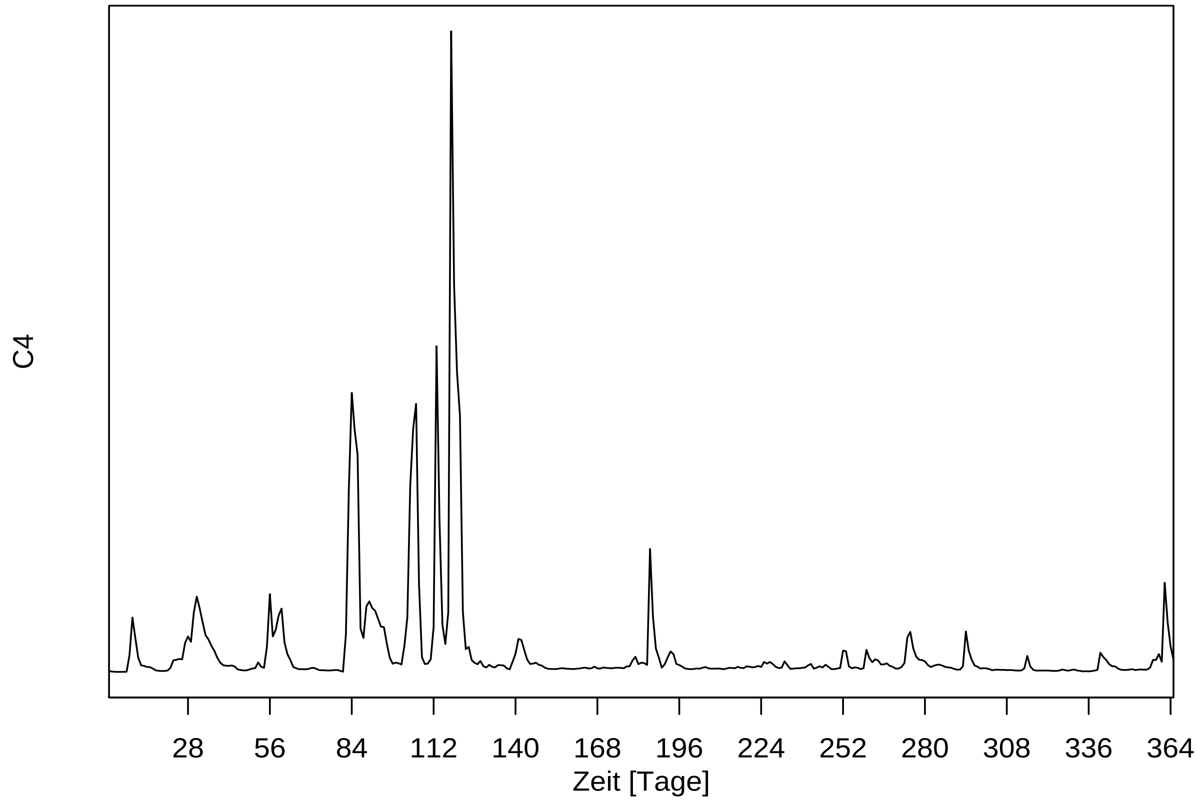



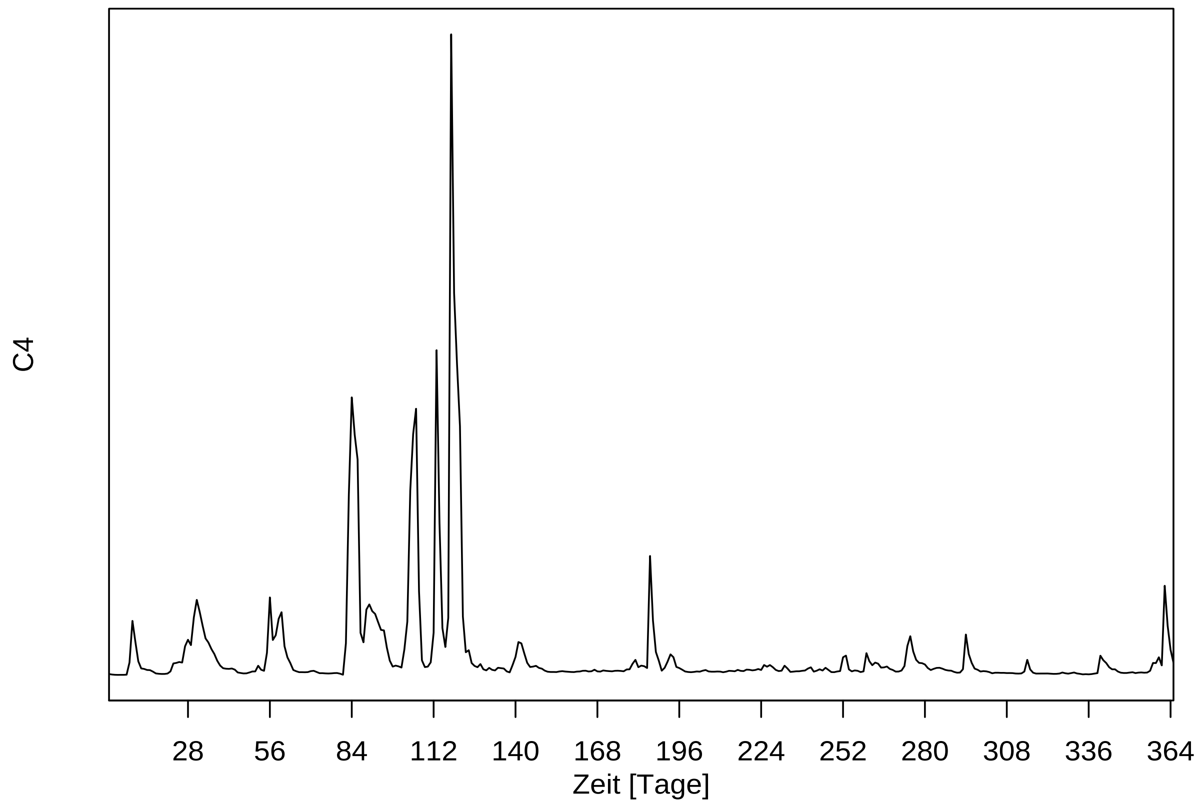
Grafik 2.3: C3 Tagesfrachten (oben), Tagesmischprobenfrachten (unten)



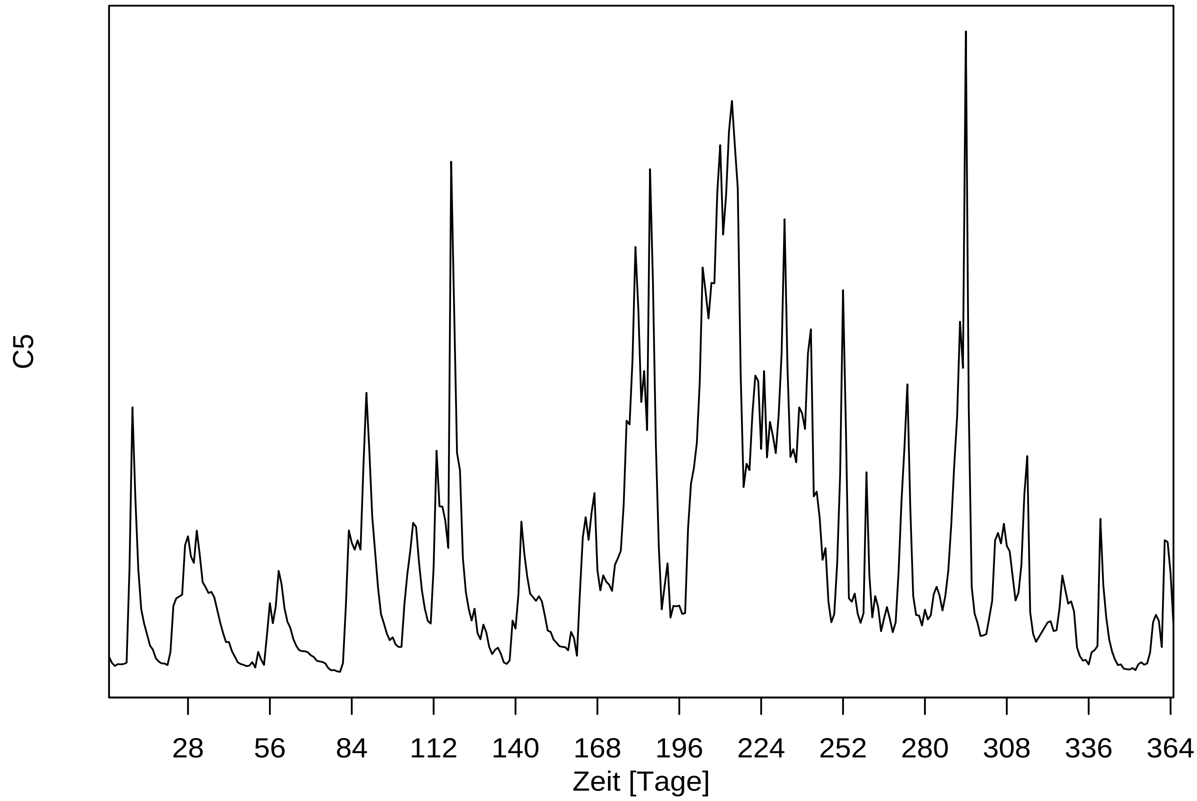



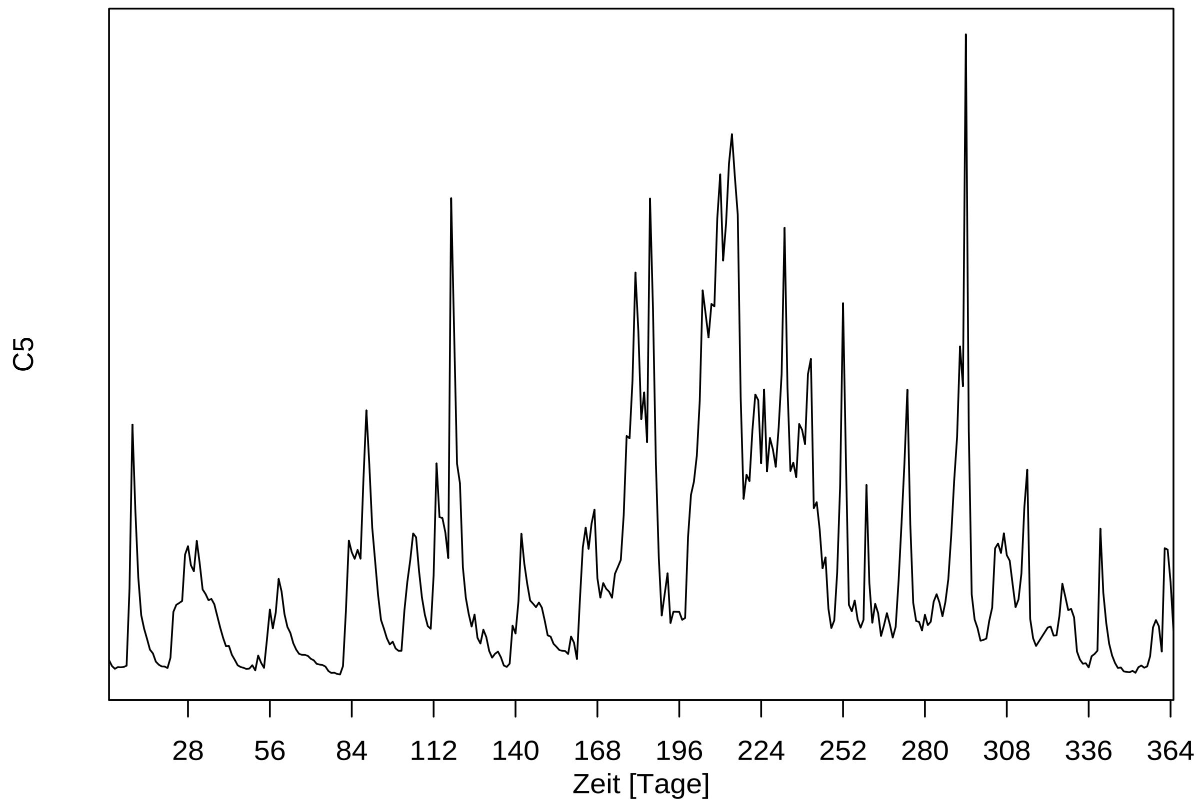
Grafik 2.4: C4 Tagesfrachten (oben), Tagesmischprobenfrachten (unten)



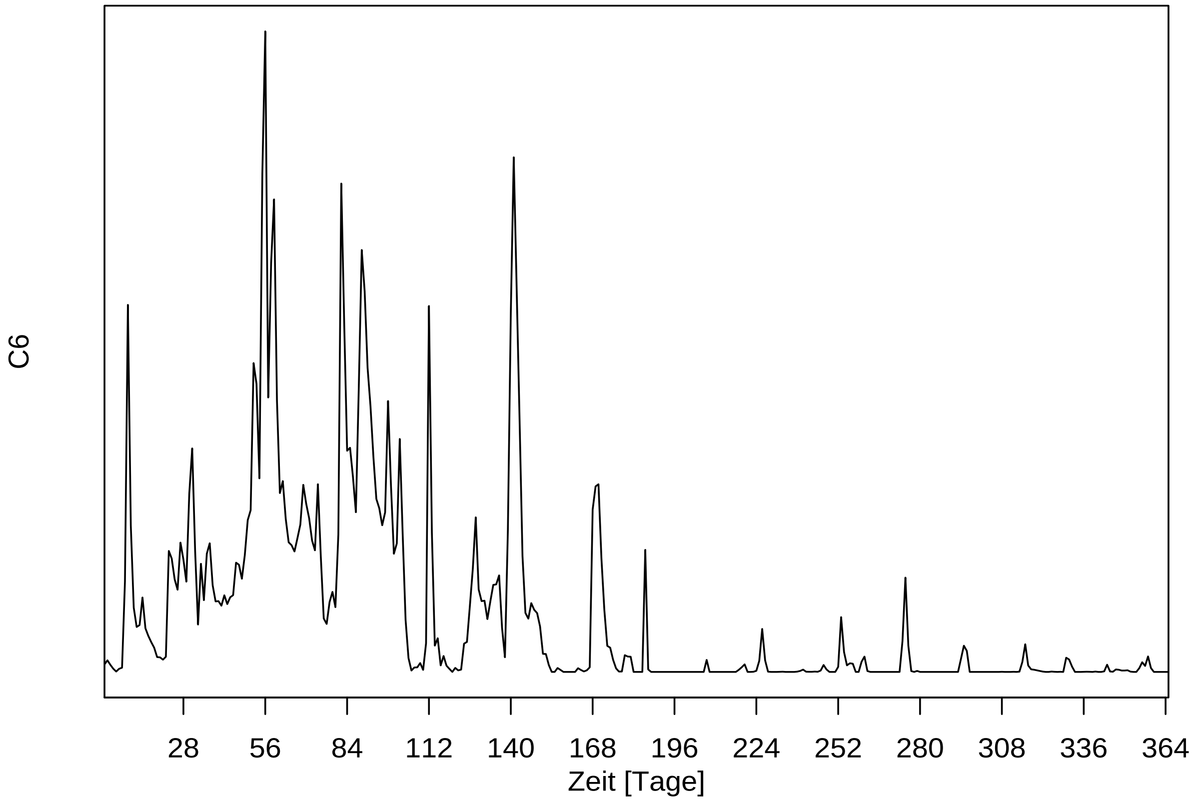



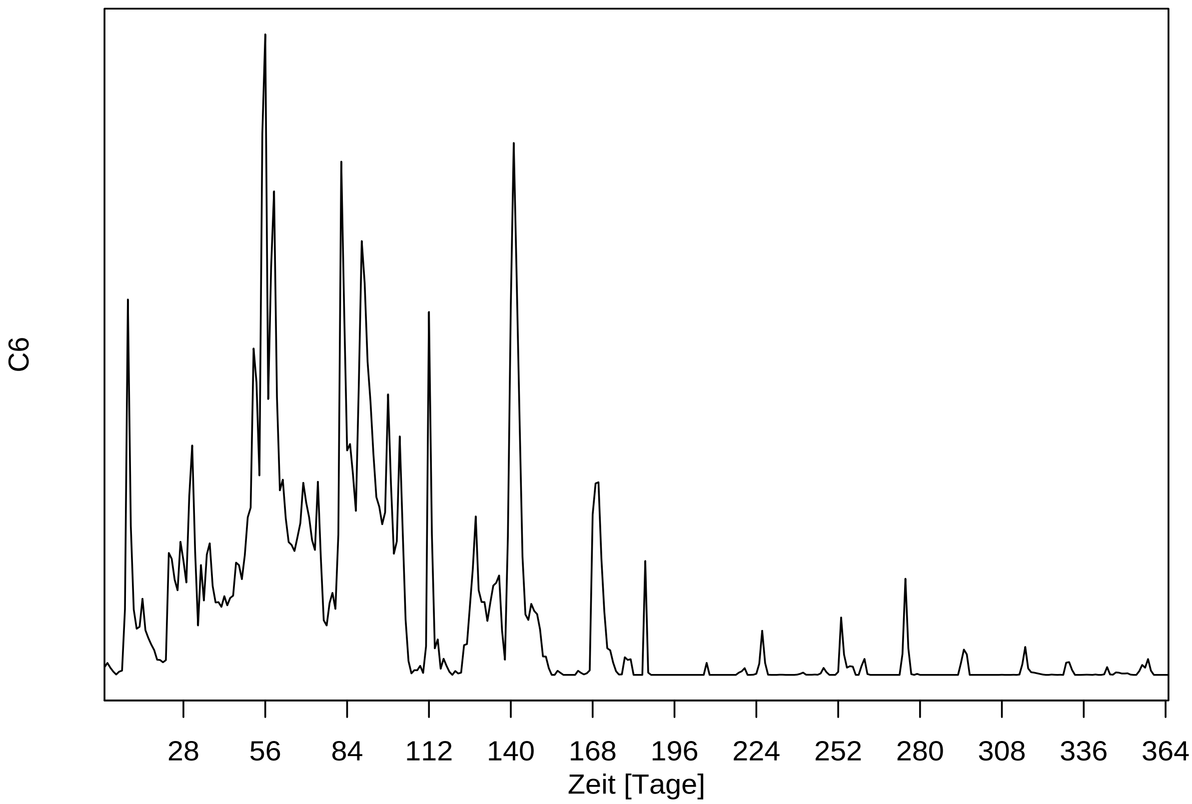
Grafik 2.5: C5 Tagesfrachten (oben), Tagesmischprobenfrachten (unten)



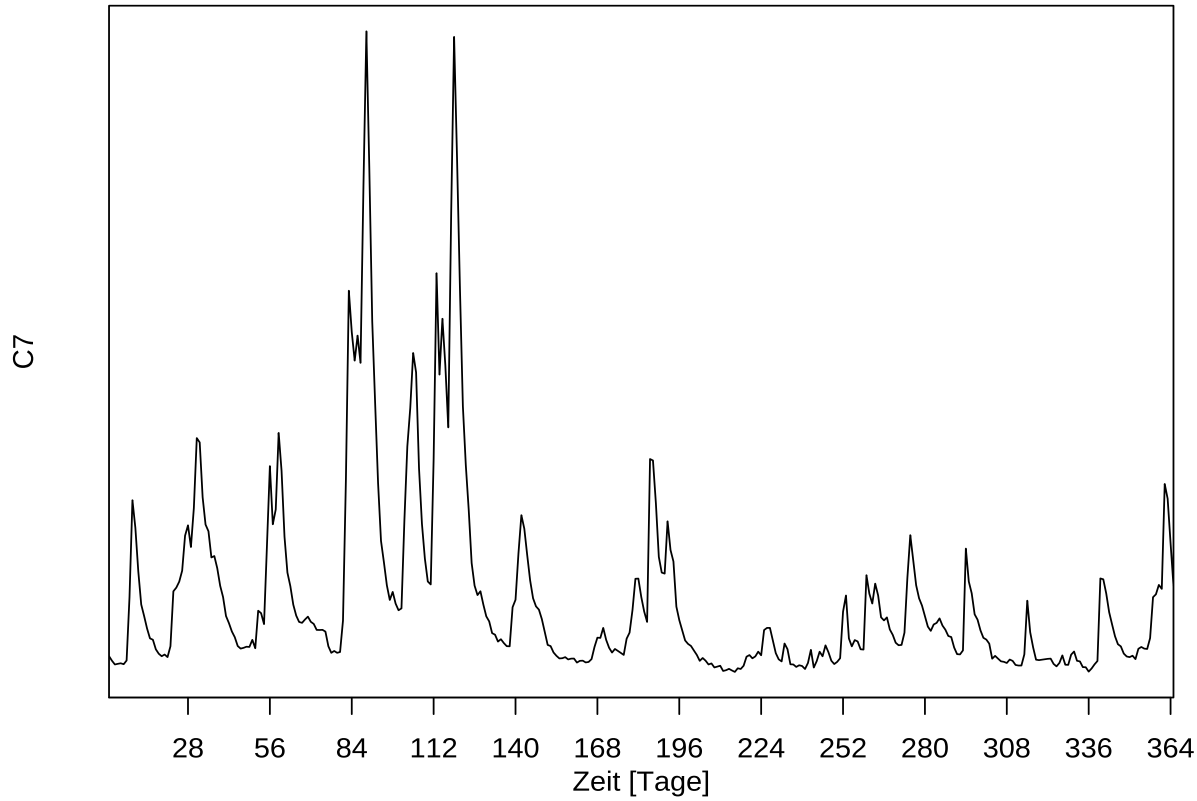



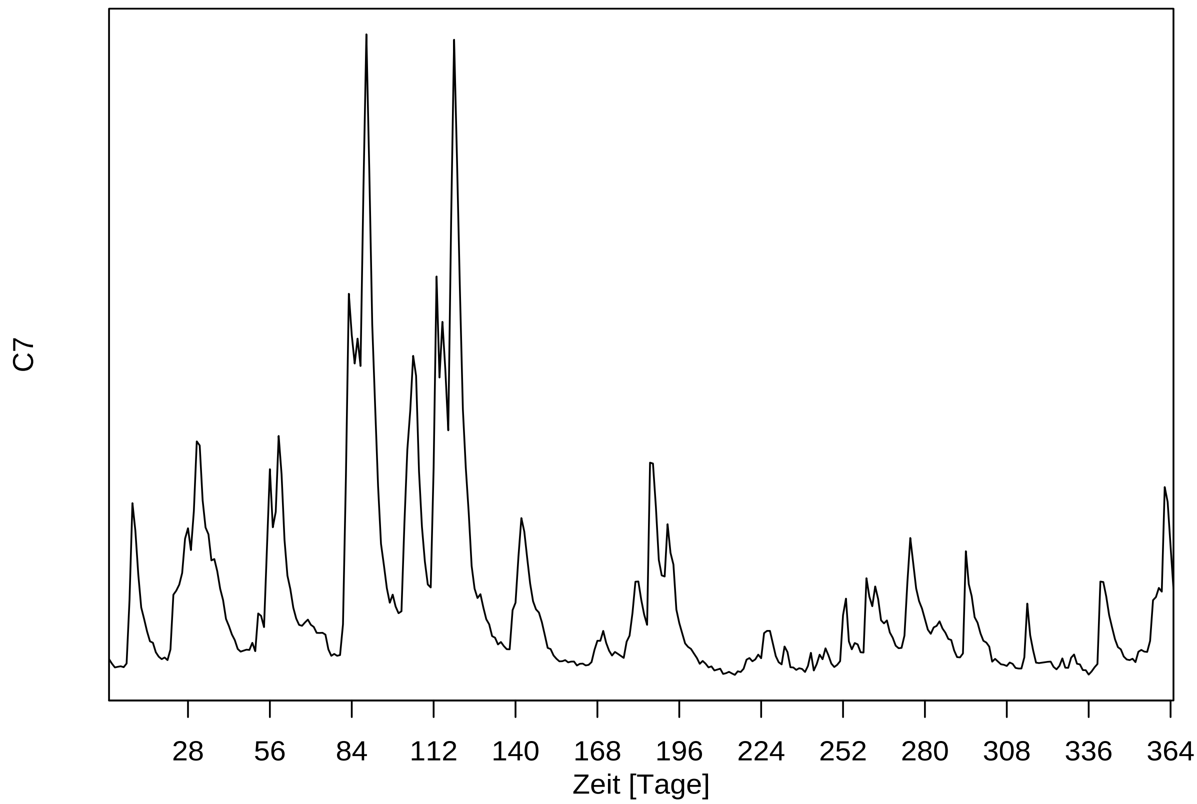
Grafik 2.6: C6 Tagesfrachten (oben), Tagesmischprobenfrachten (unten)



Grafik 2.7: C7 Tagesfrachten (oben), Tagesmischprobenfrachten (unten)



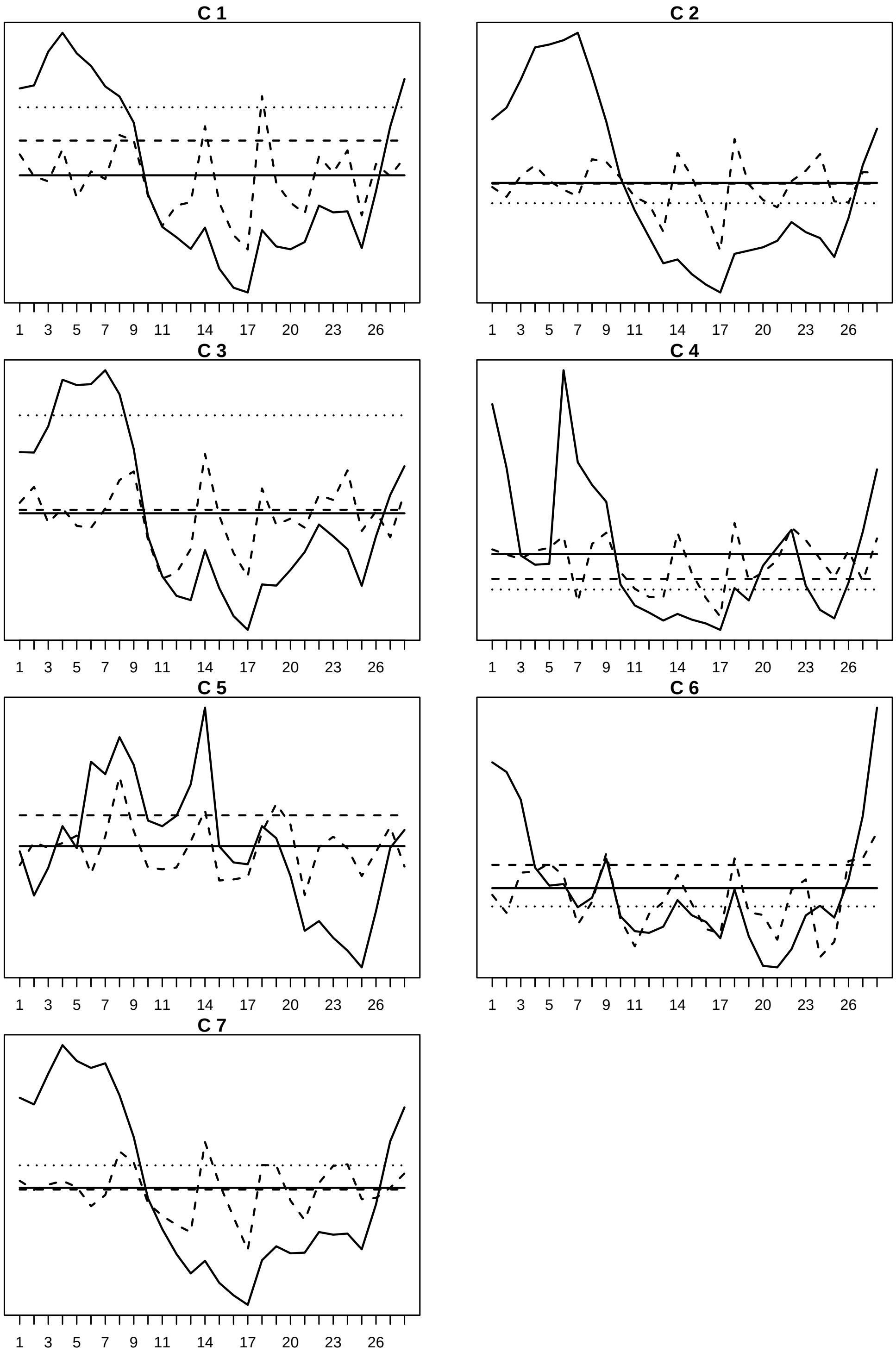



## A2 Frachtberechnung bei mehrwöchentlicher Misch- und Stichprobenstrategie mit Datensatz 1 aus Kapitel 4 zu Abschnitt 2.3.1 Beispielrechnungen

Grafiken 3:

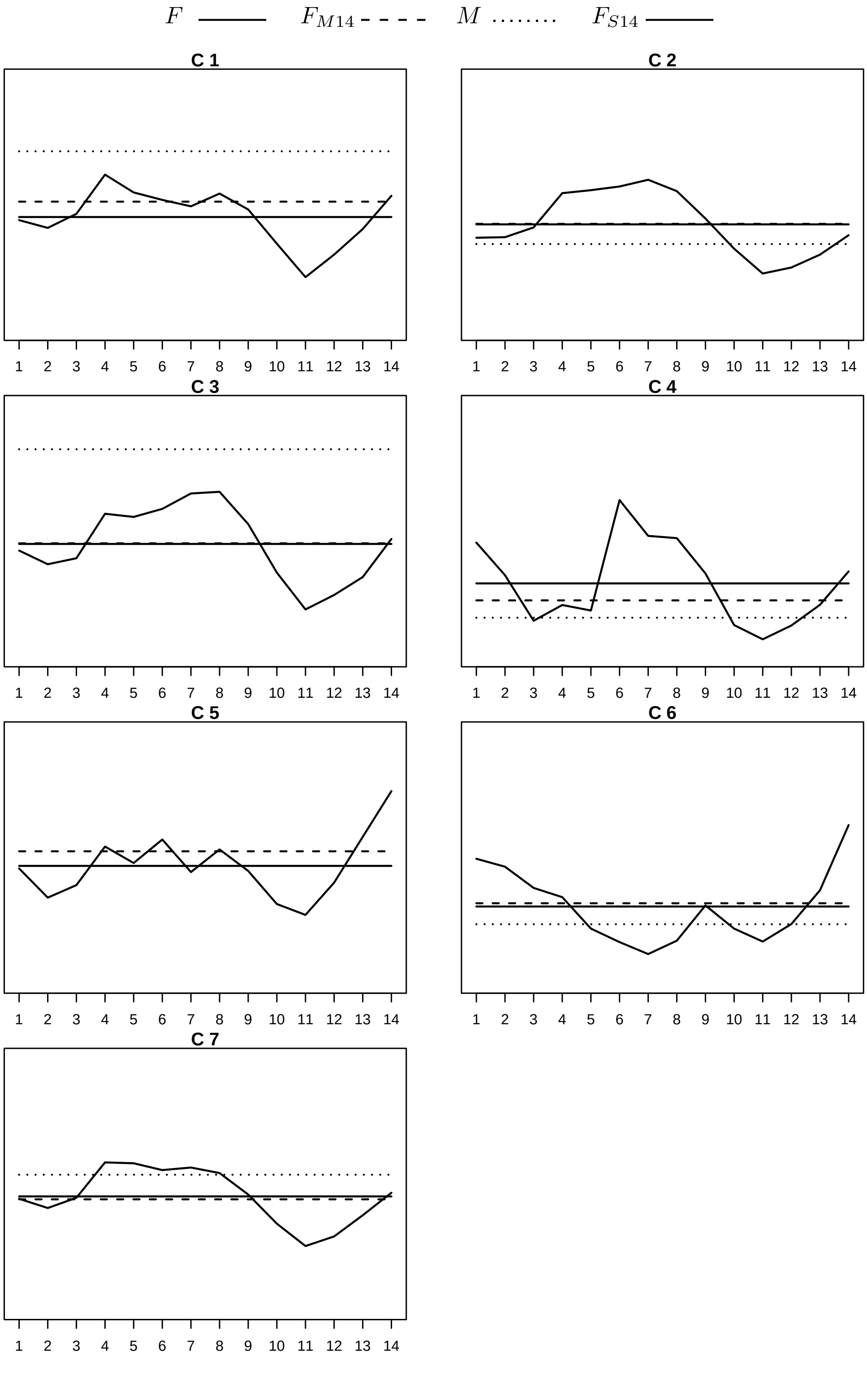
Frachtschätzer $F_M$ nach 28-tägiger Mischprobenstrategie, alle 28 Schätzwerte $F_S$ und $F_S^{(g)}$ nach der systematischen Stichprobenstrategie und die Mischprobenfracht $M$ im Vergleich mit der Fracht $F$.

$F$ ——— $F_{M28}$ - - - - $M$ ........ $F_{S28}$ ——— $F_{S28}^{(g)}$ - - - -



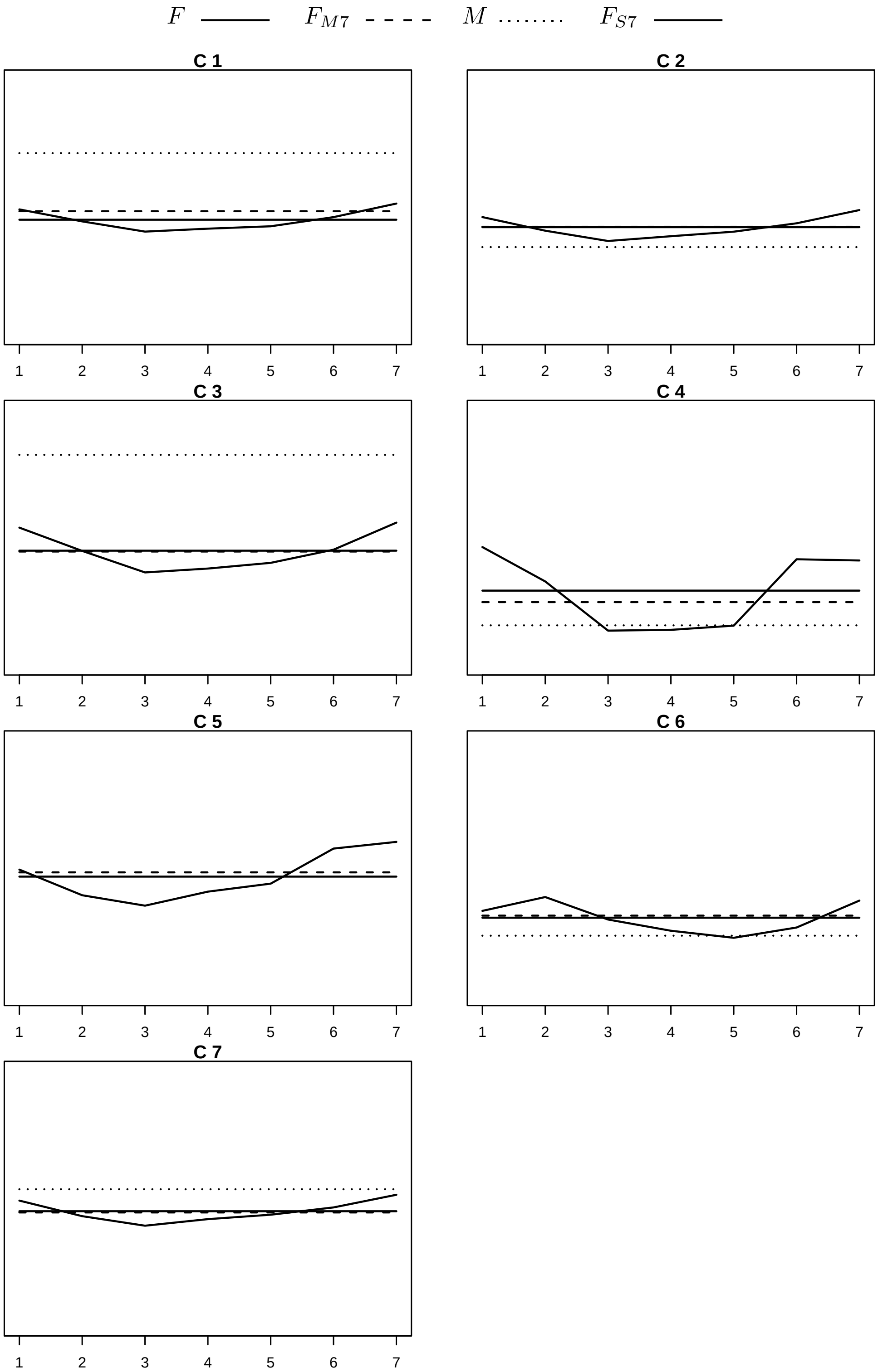
Grafiken 4:

Frachtschätzer $F_M$ nach 14-tägiger Mischprobenstrategie, alle 14 Schätzwerte $F_S$ und $F_S^{(g)}$ nach der systematischen Stichprobenstrategie und die Mischprobenfracht $M$ im Vergleich mit der Fracht $F$.



Grafiken 5:

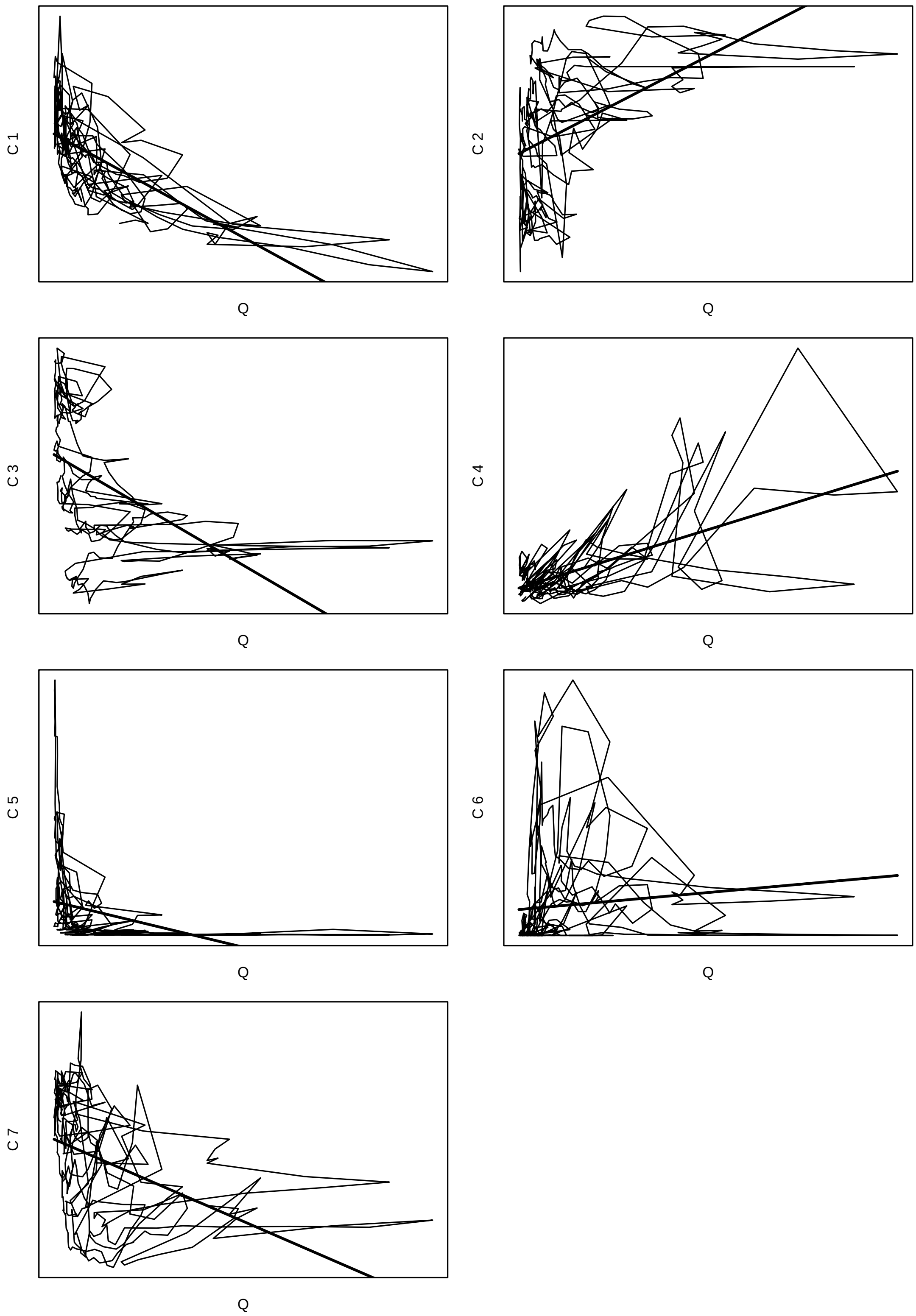
Frachtschätzer $F_M$ nach 7-tägiger Mischprobenstrategie, alle 7 Schätzwerte $F_S$ und $F_S^{(g)}$ nach der systematischen Stichprobenstrategie und die Mischprobenfracht $M$ im Vergleich mit der Fracht $F$.



## A3 Datensatz 1 zum Frachtberechnungsvergleich

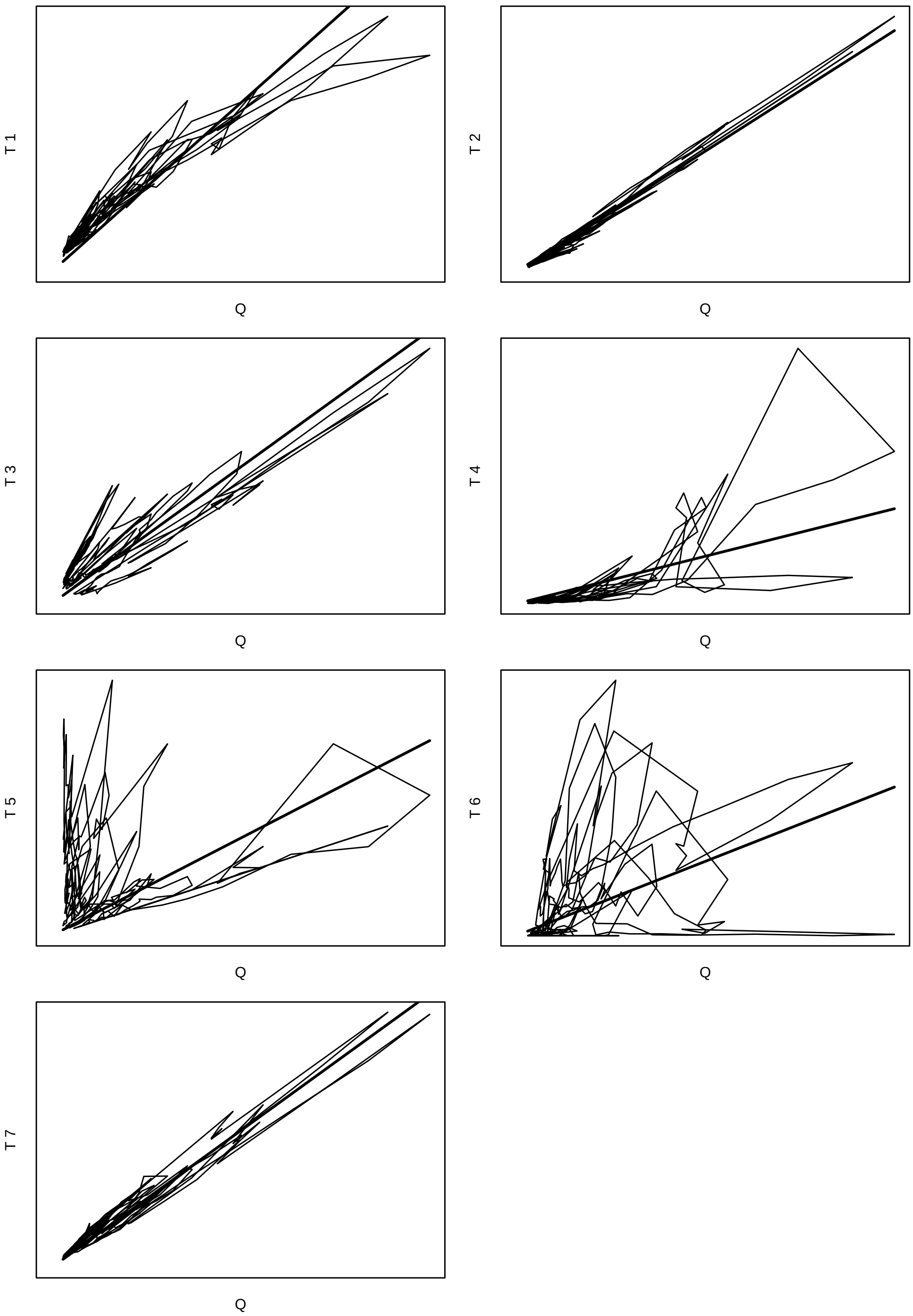
Grafiken 6:

Zusammenhangsdiagramme der Konzentrationen $C$ (1 bis 7) mit dem Abfluss $Q$, Intervall-Mittelwerte und Intervall-(Ko-)Variationskoeffizienten sowie die theoretisch frachtäquivalenten Konzentrationen $\widetilde{C} = \mu_C + (Q - \mu_Q)\widetilde{\beta}$ mit $\widetilde{\beta} = \frac{\sigma_{CQ}}{\sigma_Q^2}$.



Grafiken 7:

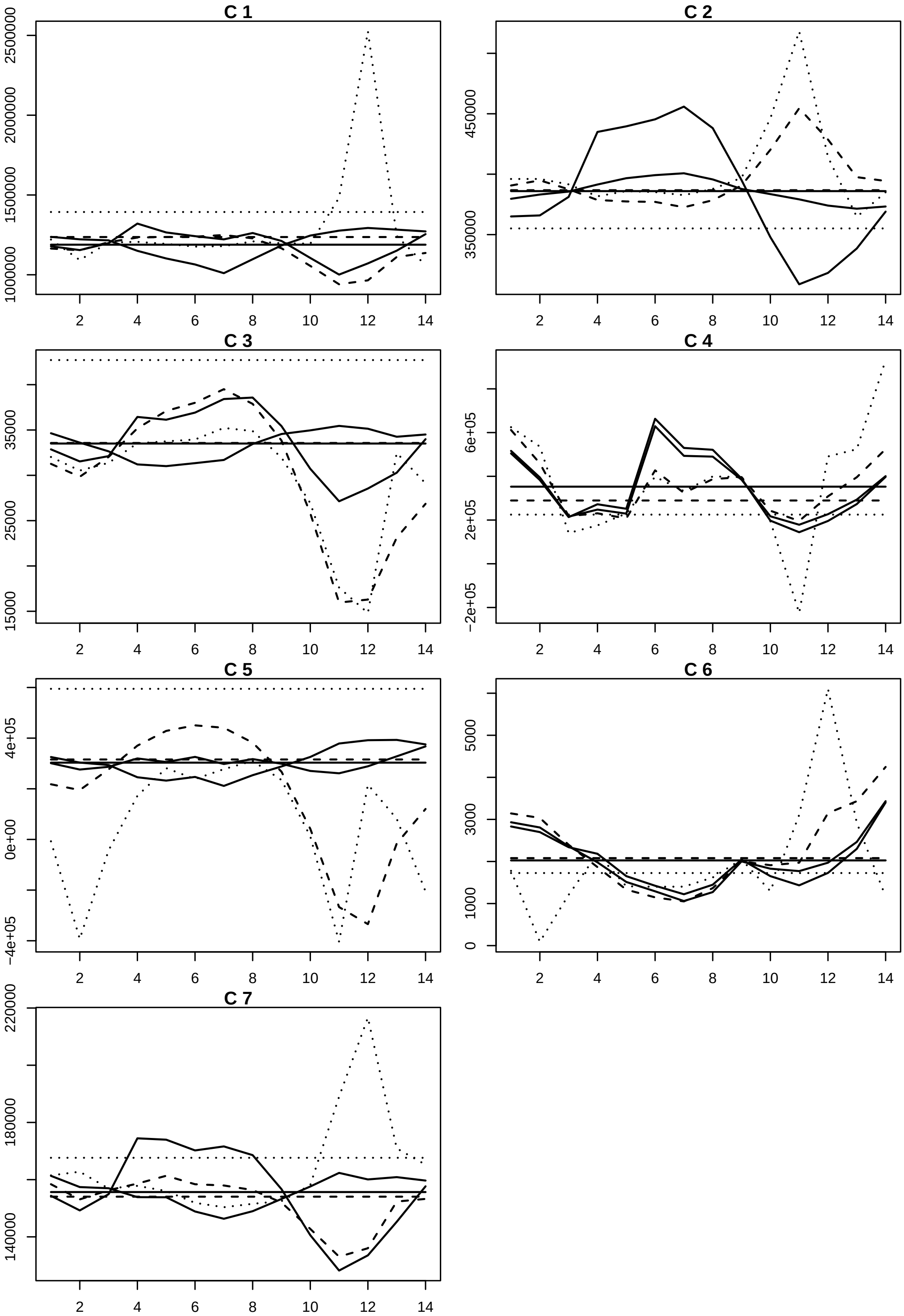
Zusammenhangsdiagramme der Transporte $T$ (1 bis 7) mit dem Abfluss $Q$, Intervall-Mittelwerte und Intervall-(Ko-)Variationskoeffizienten sowie die theoretisch frachtäquivalenten Transporte $\widetilde{T} = Q\widetilde{\beta}$ mit $\widetilde{\beta} = \frac{\mu_T}{\mu_Q}$.



Grafiken 8:

Fracht $F$, Frachtschätzung $F_M$ nach der Mischprobenstrategie, Mischprobenfracht $M$ und alle 14 Frachtschätzer $F_S$ wie in Grafiken 4 nach der systematischen Stichprobe sowie die stetigkeitskorrigierten Schätzer $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(7)}$, $\widehat{F}^{(7a)}$

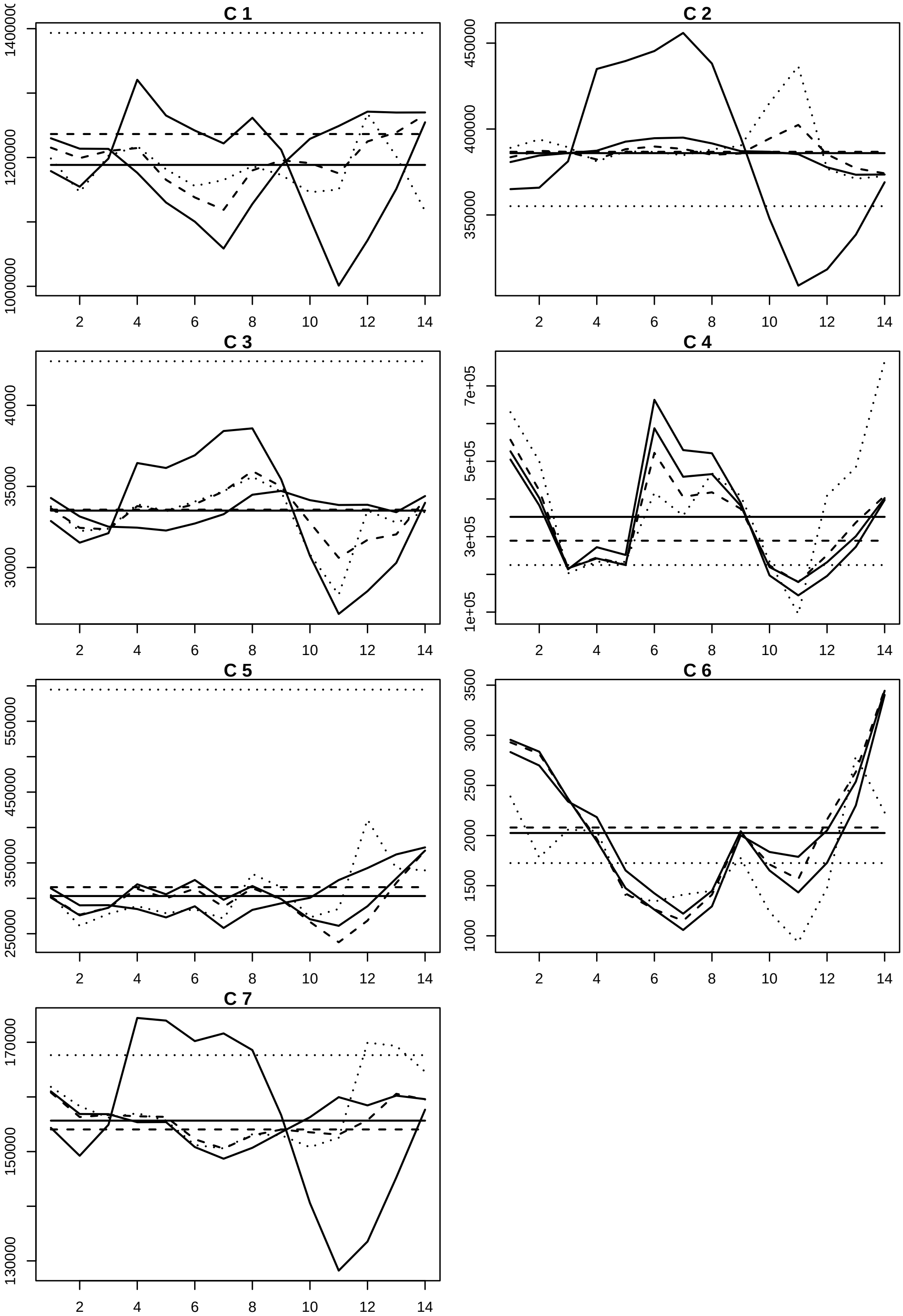
$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ ——— $\widehat{F}^{(7)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7a)}$ ........



Grafiken 9:

Fracht $F$, Frachtschätzung $F_M$ nach der Mischprobenstrategie, Mischprobenfracht $M$ und alle 14 Frachtschätzer $F_S$ wie in Grafiken 4 nach der systematischen Stichprobe sowie die stetigkeitskorrigierten Schätzer $\widehat{F}^{(5)}$, $\widehat{F}^{(6)}$, $\widehat{F}^{(6a)}$

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ ——— $\widehat{F}^{(6)}$ - - - - $\widehat{F}^{(6a)}$ .......



## A4 Datensatz 2 zum Frachtberechnungsvergleich

Grafiken 10: Abfluss- und Konzentrationsganglinien

| Nr. | Messgröße | Messstelle | Zeitraum |
|---|---|---|---|
| 00a | Q | Bimmen, Rhein | 75 – 89 |
| 01 | CL Tagesmittelwerte | | 75 – 88 |
| 01a | LF als Modell-Einflussgröße | | 75 – 88 |
| 02 | $O_2$ | | 75 – 89 |
| 02a | Temperatur TP als Modell-Einflussgröße | | 76 – 85 |
| 03 | CL Tagesmischproben | | 76 – 87 |
| 03a | CL Vergleich Tagesmischproben und -mittelwerte | | 76 – 87 |
| 04 | $NO_3$ | | 76 – 87 |
| 05 | $NH_4$ | | 76 – 87 |
| 06 | $KMnO_4$ | | 76 – 87 |
| 07 | CSB | | 76 – 86 |
| 08 | BSB | | 76 – 84 |
| 09 | $NO_2$ | | 77 – 84 |
| 00b | Q | Mainz, Rhein | 78 – 89 |
| 10 | CL | | 82 – 89 |
| 10a | LF als Modell-Einflussgröße | | 82 – 89 |
| 11 | $NO_x$ | | 78 – 89 |
| 12 | $PO_4$ | | 78 – 89 |
| 13 | $O_2$ | | 78 – 89 |
| 00c | Q | Palzem, Mosel | 76 – 90 |
| 14 | CL | | 76 – 90 |
| 15 | P | | 76 – 90 |
| 16 | $NO_3$ | | 76 – 90 |
| 17 | $NO_2$ | | 76 – 90 |
| 17a | $NO_2$ | | 84 – 90 |
| 18 | $NH_4$ | | 76 – 90 |
| 18a | $NH_4$ | | 84 – 90 |

Grafiken 11: Alle 14 möglichen Werte der Frachtschätzer $F_S$, $\widehat{F}^{(1)}$, $\widehat{F}^{(7)}$ aufgrund der 14-tägigen systematischen Stichprobe im Vergleich zu $F$, $F_M$ (14-tägig), $M$

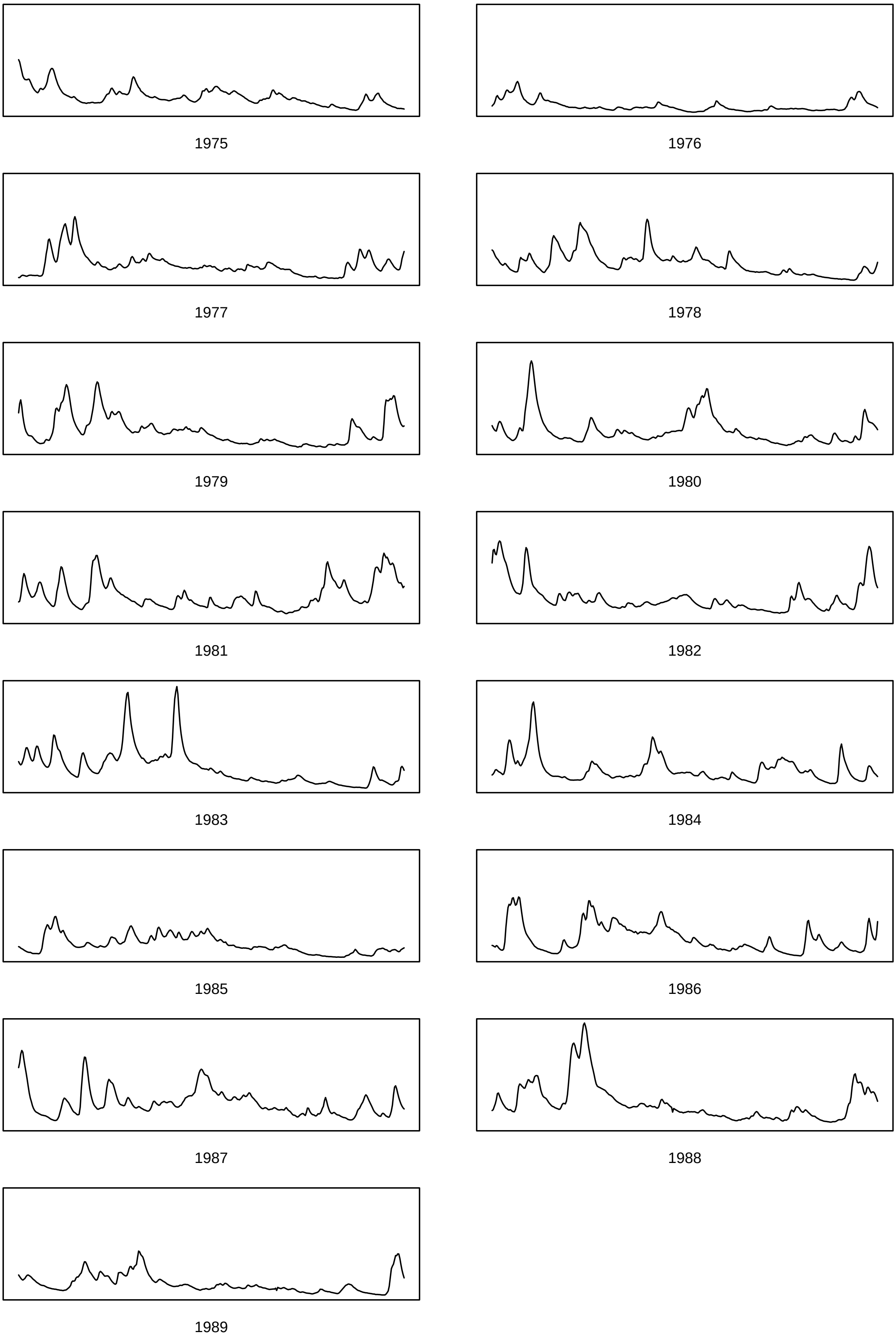
$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$- - - - $\widehat{F}^{(7)}$.......

Grafiken 12:

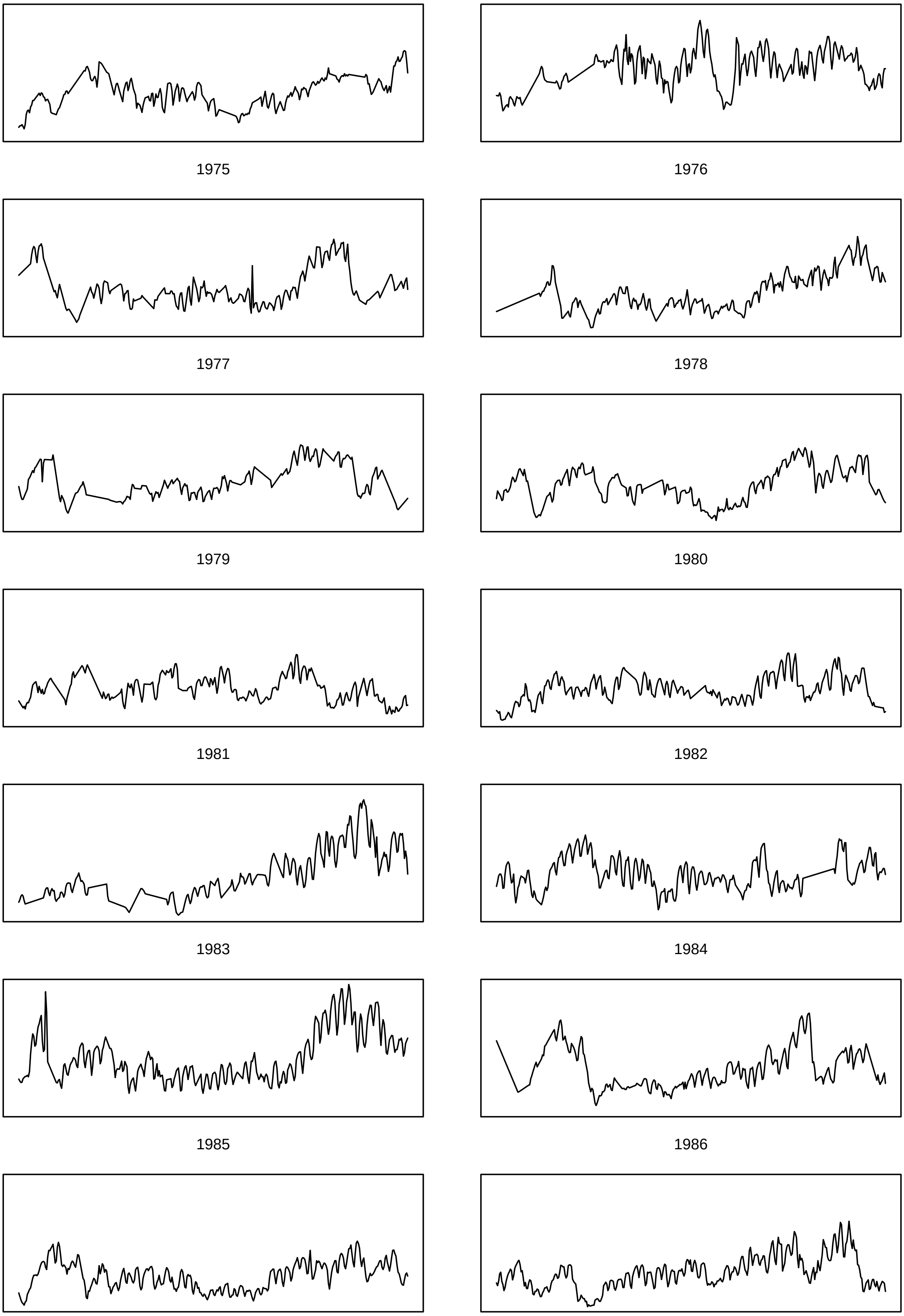
Alle 14 möglichen Werte der Frachtschätzer $F_S$, $\widehat{F}^{(5)}$, $\widehat{F}^{(6)}$ aufgrund der systematischen Stichprobe im Vergleich zu $F$, $F_M$ (14-tägig), $M$

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$- - - - $\widehat{F}^{(6)}$.......

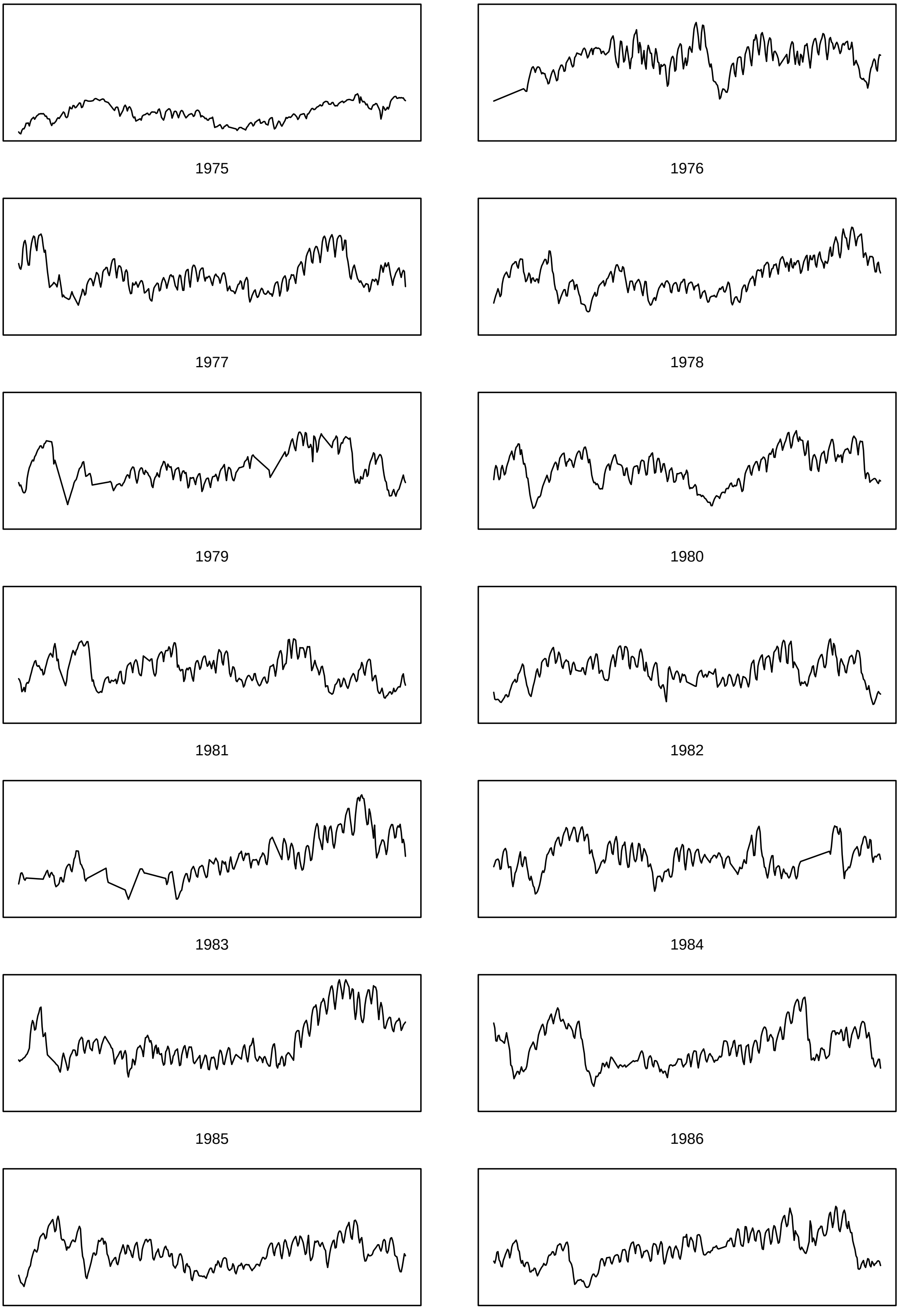
Grafik 10.00a: Q Bimmen, Rhein



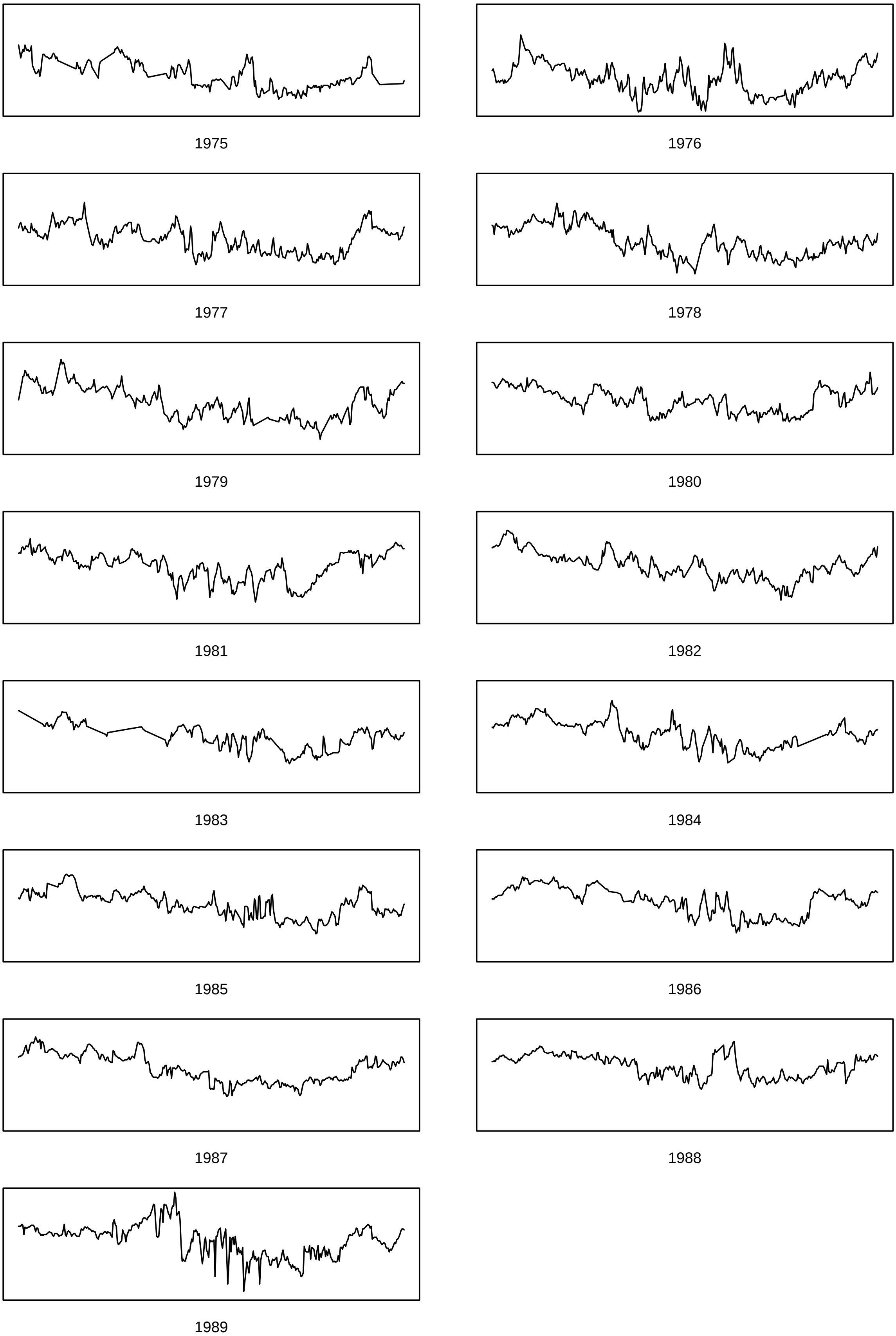
Grafik 10.01: CL Tagesmittelwerte Bimmen, Rhein
(mit deutlicher Wochenschwingung)



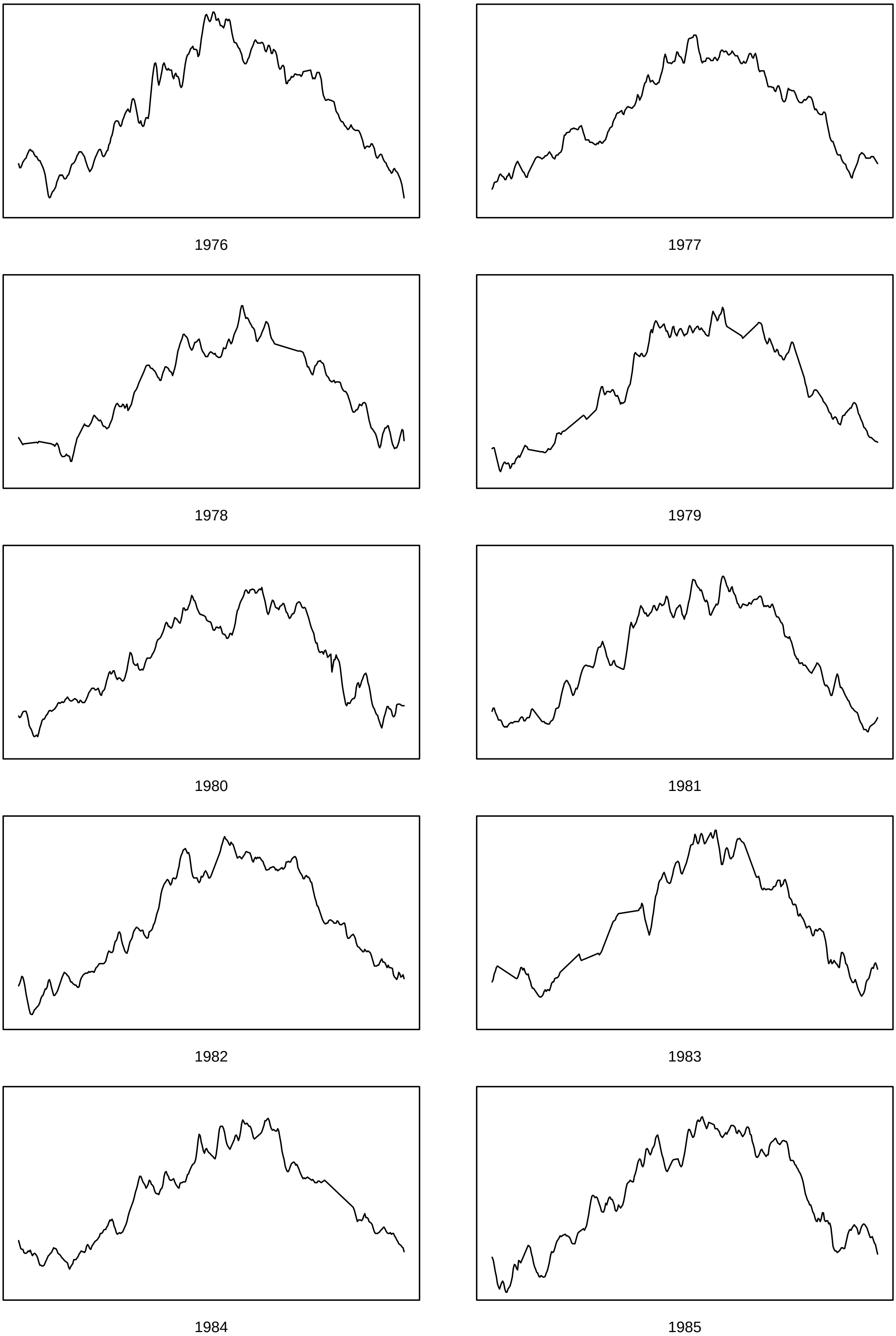
Grafik 10.01a: LF als Modell-Einflussgröße für CL Bimmen, Rhein
(mit deutlicher Wochenschwingung)



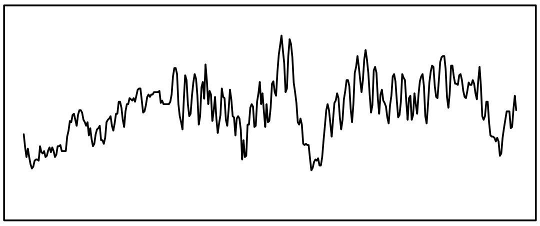
Grafik 10.02: $O_2$ Bimmen, Rhein
(mit leichter Jahresschwingung)



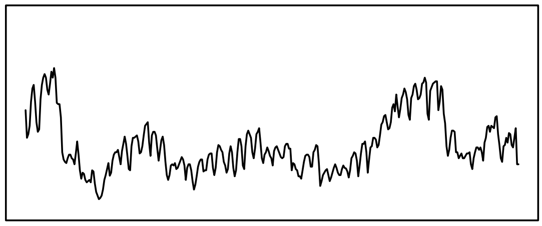
Grafik 10.02a: Temperatur T als Modell-Einflussgröße für $O_2$ Bimmen, Rhein
(mit deutlicher Jahresschwingung)



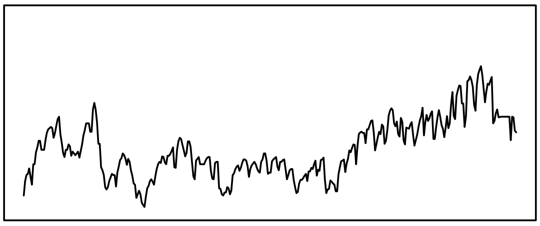
Grafik 10.03: CL Tagesmischproben Bimmen, Rhein
(mit deutlicher Wochenschwingung)



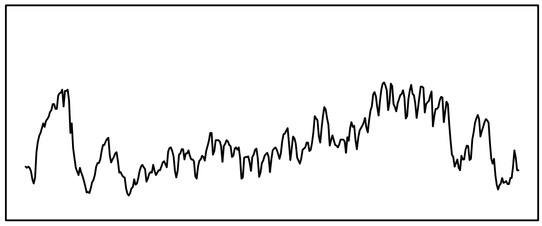
1976



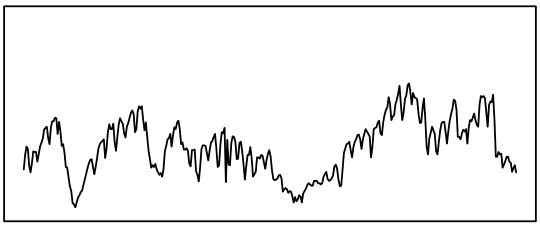
1977



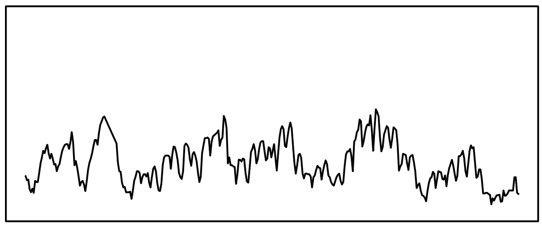
1978



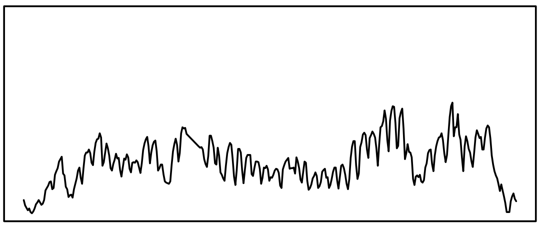
1979



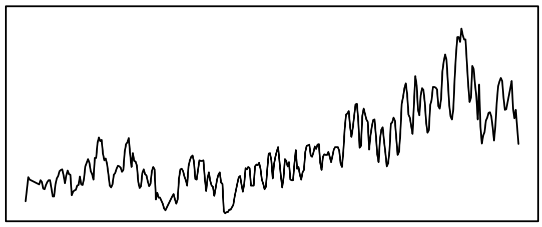
1980



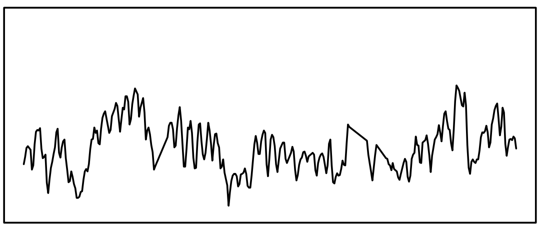
1981



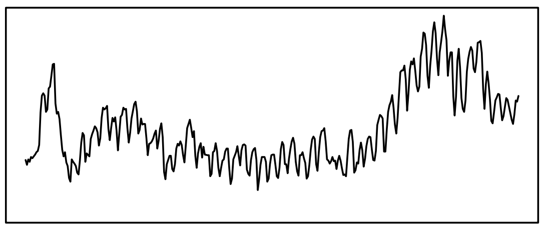
1982



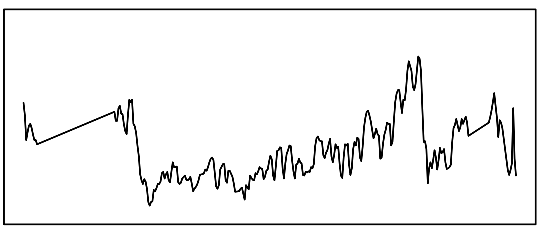
1983



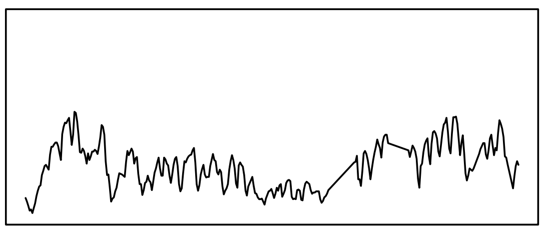
1984



1985

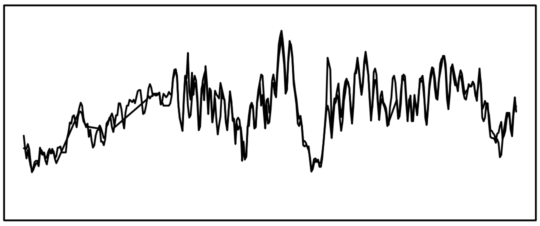


1986

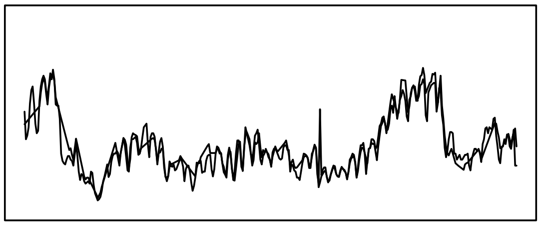


1987

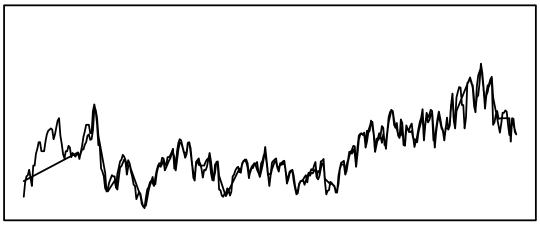
Grafik 10.03a: CL Vergleich Tagesmischproben und -mittelwerte Bimmen, Rhein
(mit deutlicher Wochenschwingung)



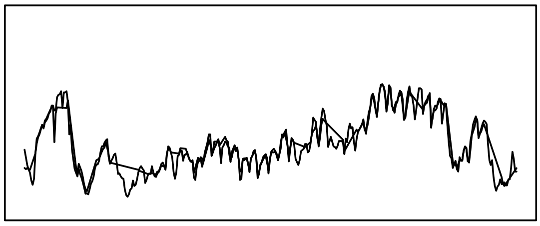
1976



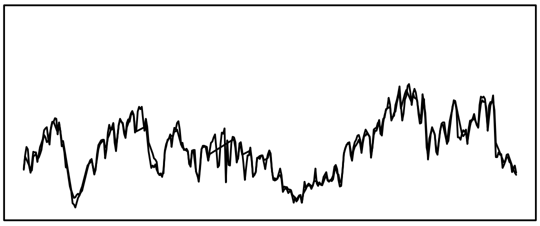
1977



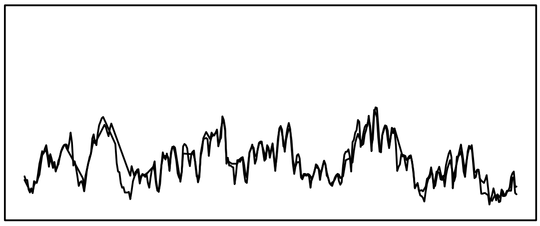
1978



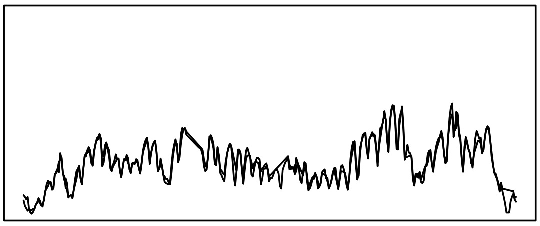
1979



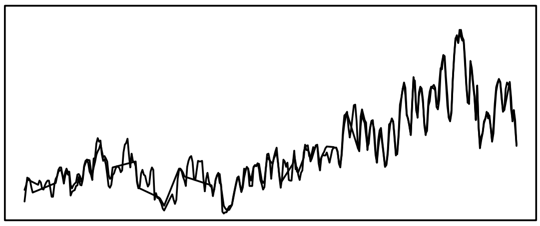
1980



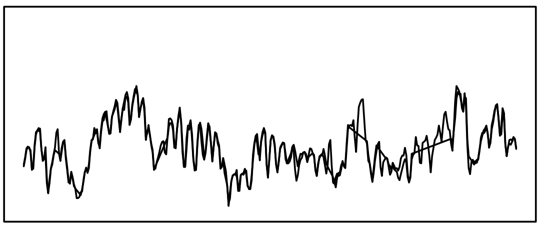
1981



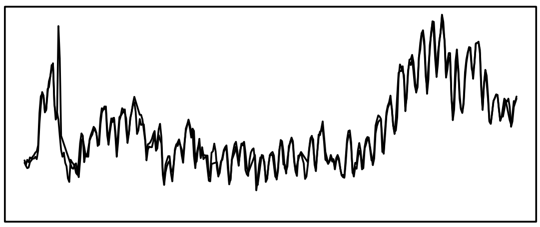
1982



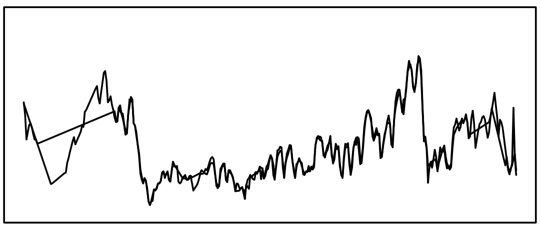
1983



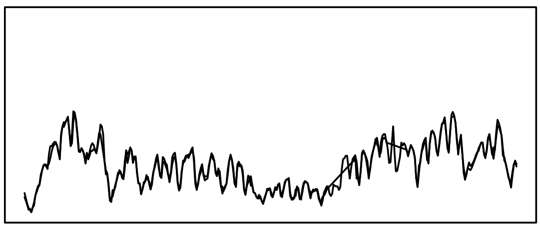
1984



1985

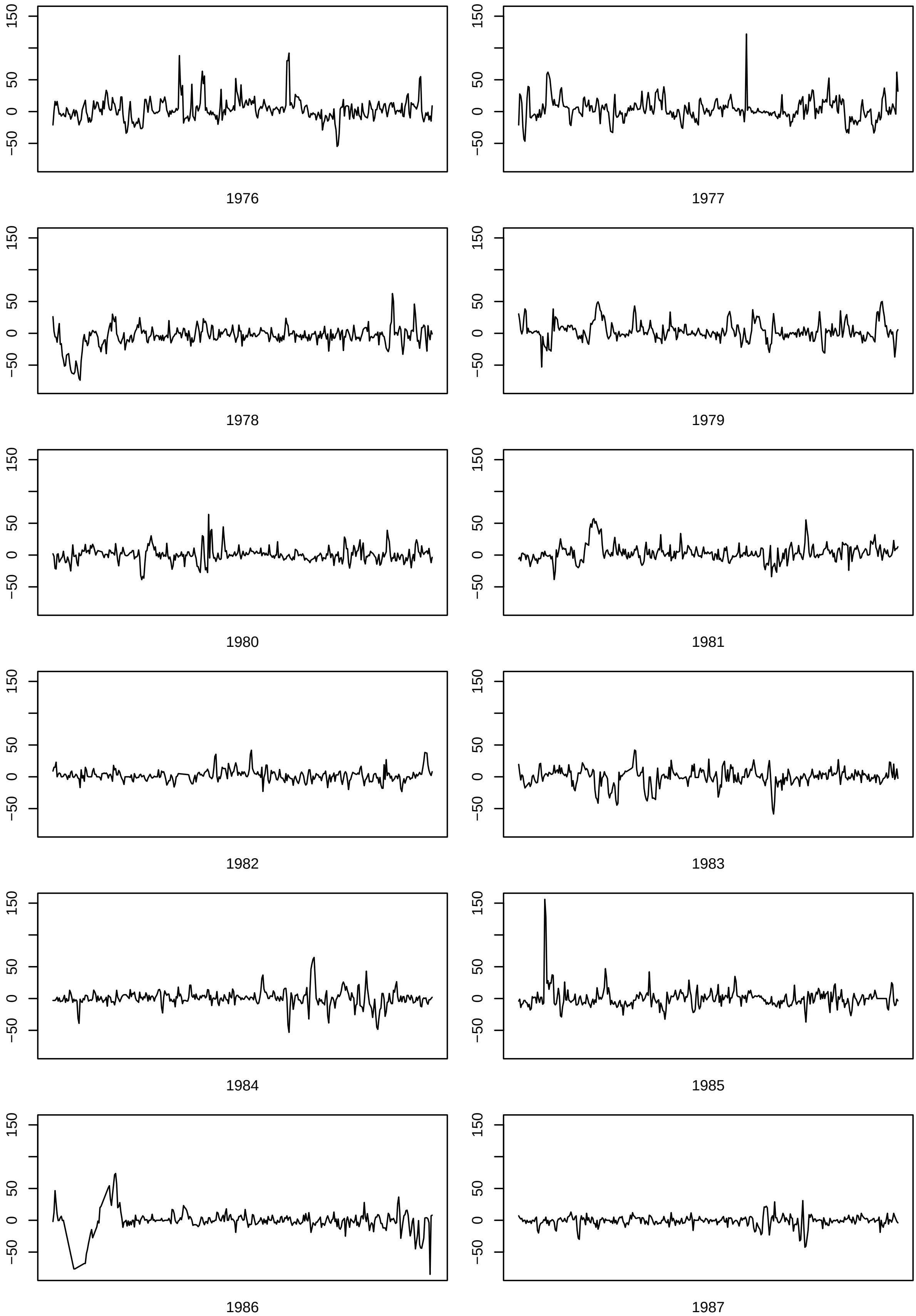


1986

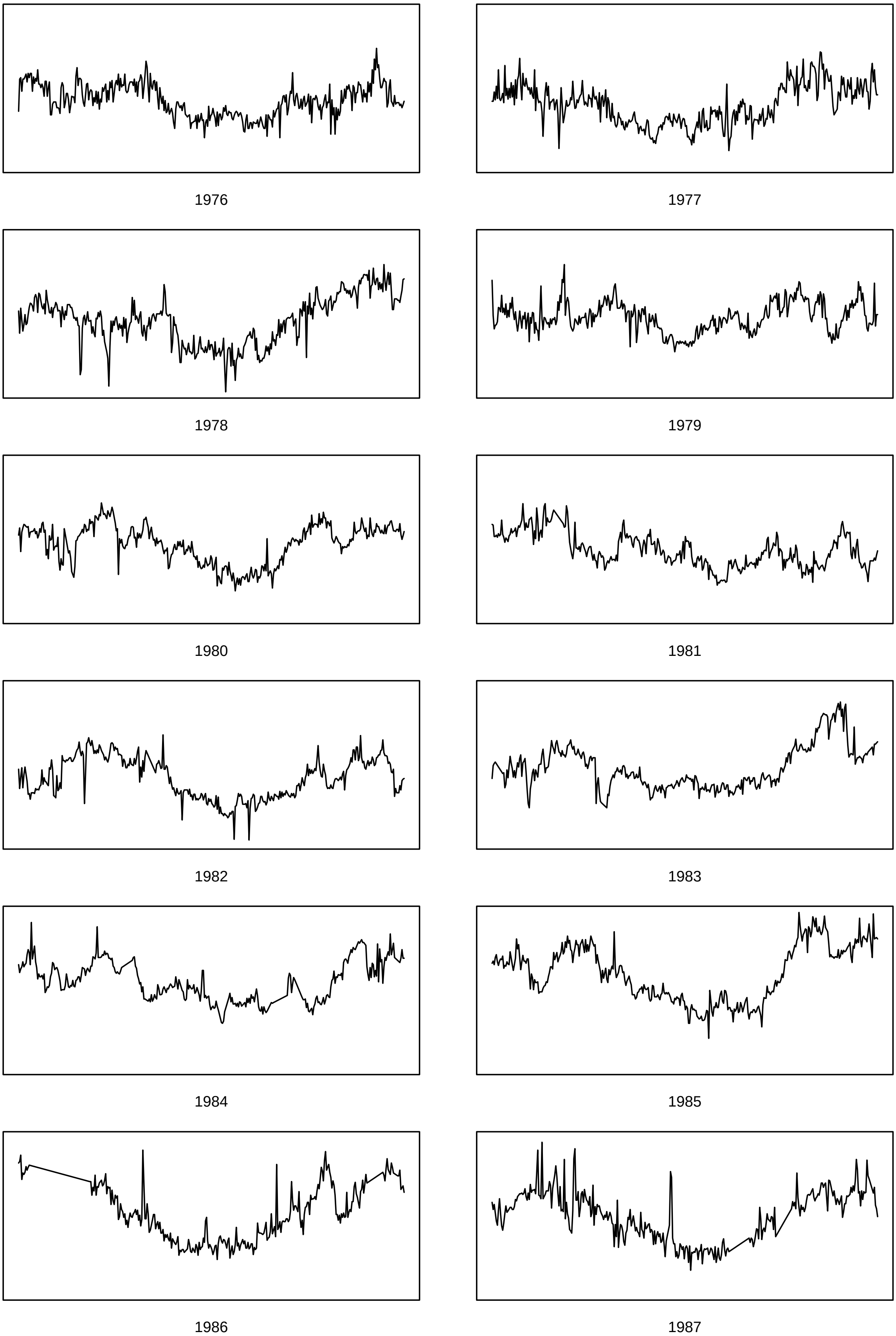


1987

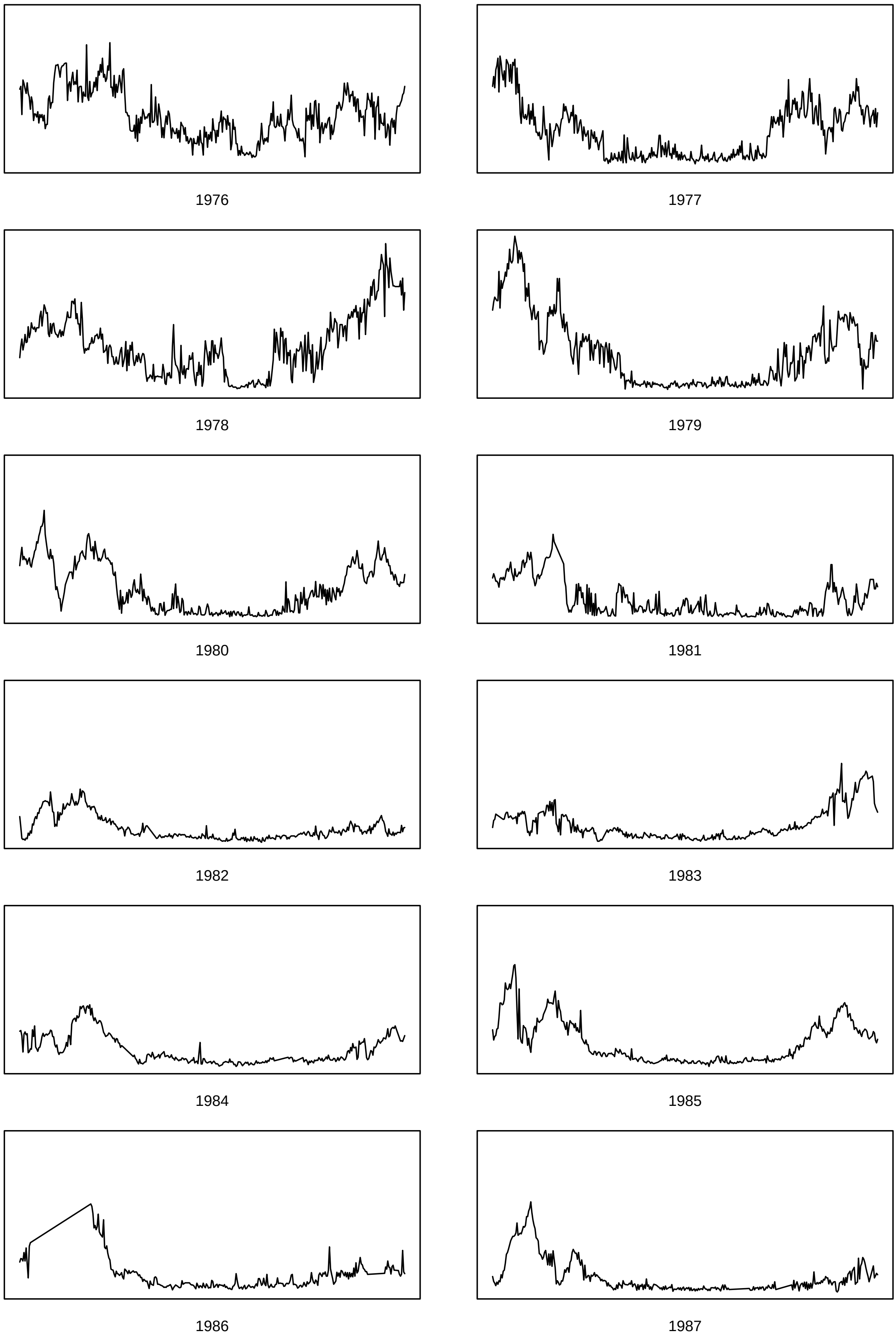
Grafik 10.03b: CL Differenz Tagesmischproben und -mittelwerte Bimmen, Rhein



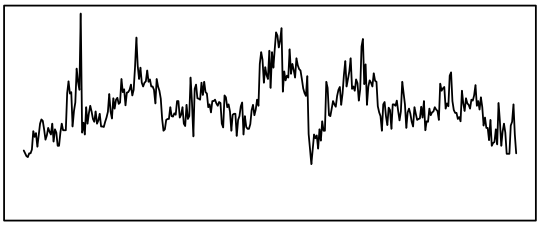
Grafik 10.04: $NO_3$ Bimmen, Rhein
(teilweise mit deutlicher Jahresschwingung)



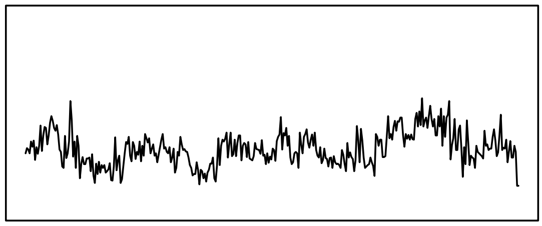
Grafik 10.05: $NH_4$ Bimmen, Rhein



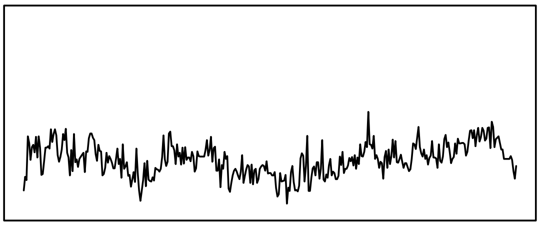
Grafik 10.06: $KMnO_4$ Bimmen, Rhein



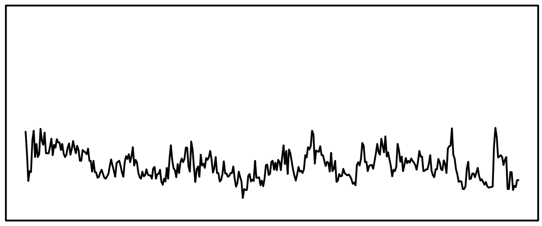
1976



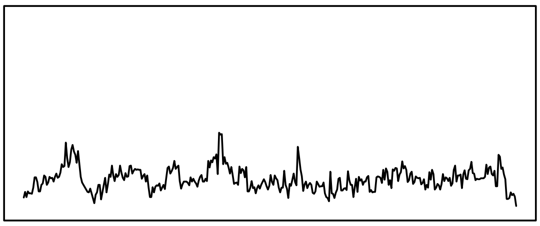
1977



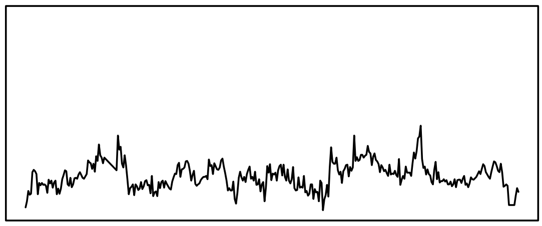
1978



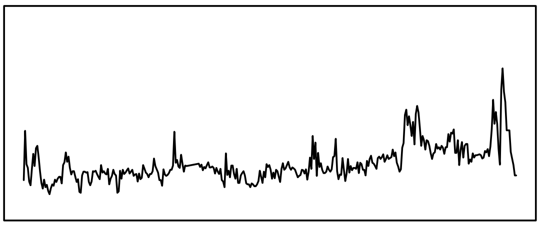
1979



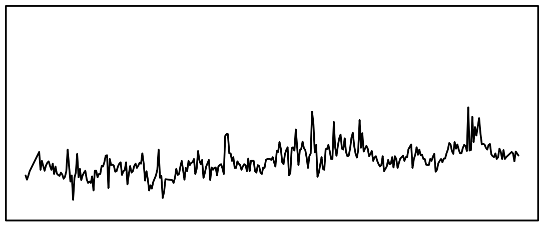
1980



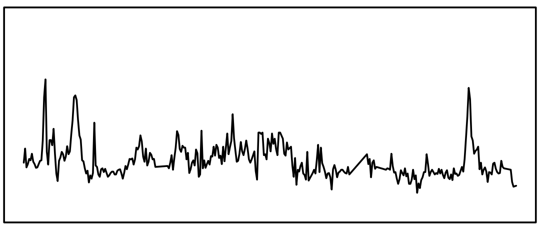
1981



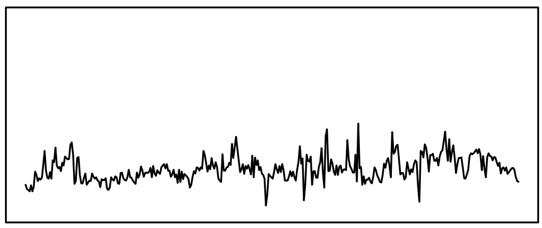
1982



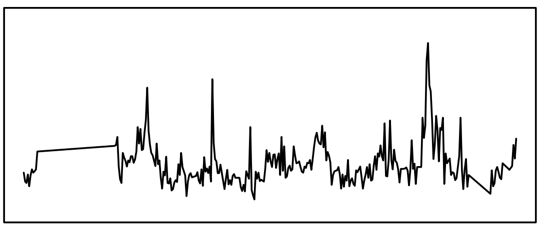
1983



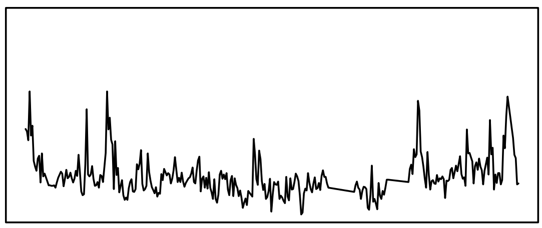
1984



1985

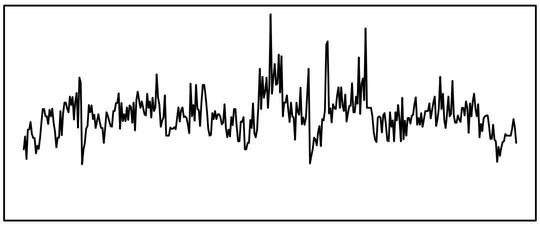


1986

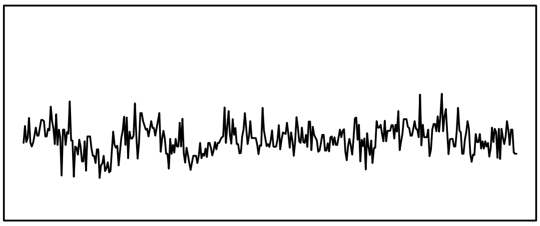


1987

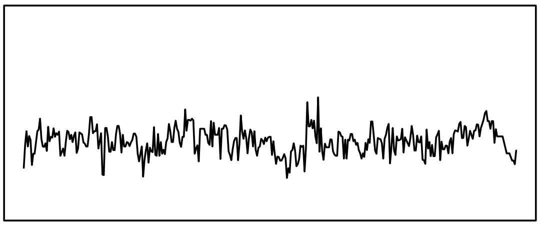
## Grafik 10.07: CSB Bimmen, Rhein



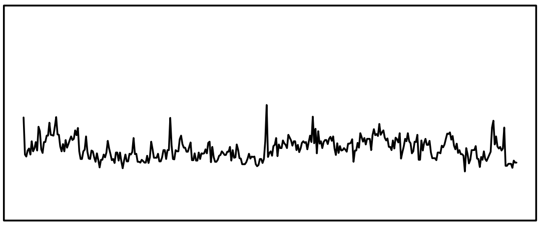
1976



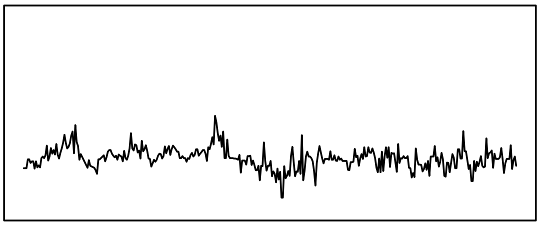
1977



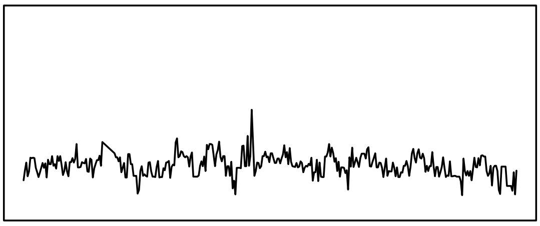
1978



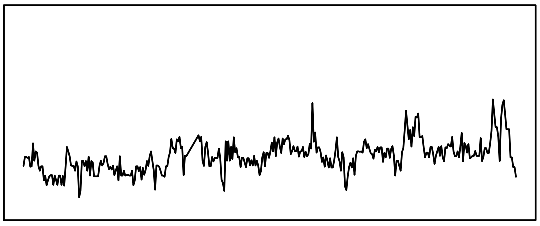
1979



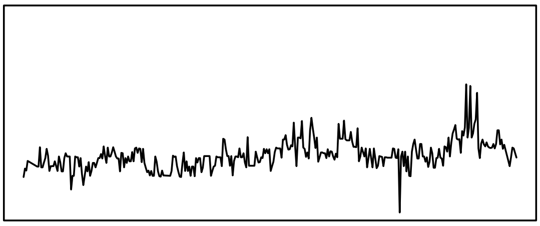
1980



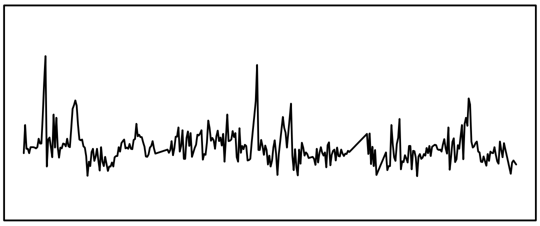
1981



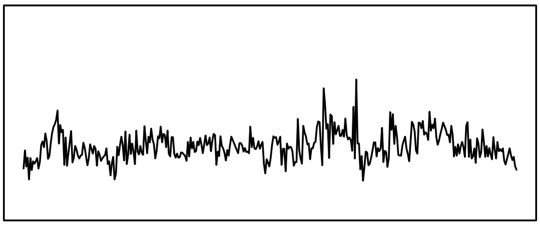
1982



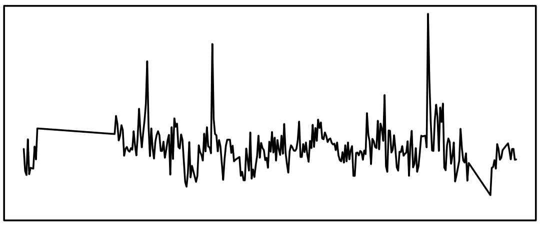
1983



1984

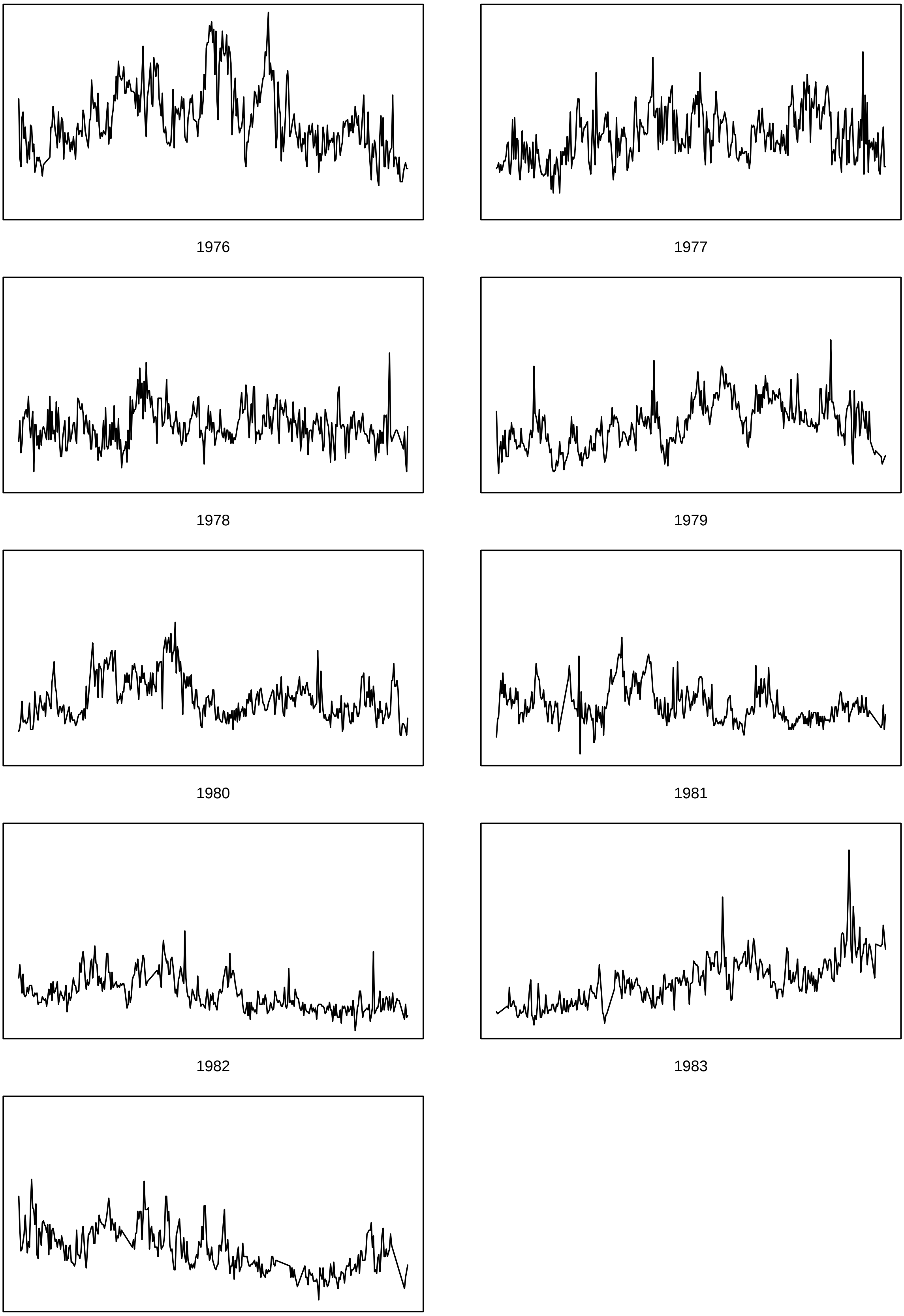


1985

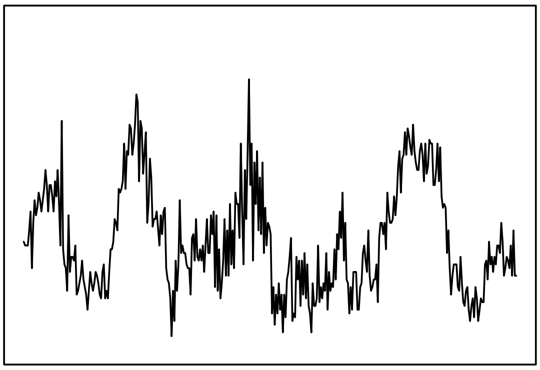


1986

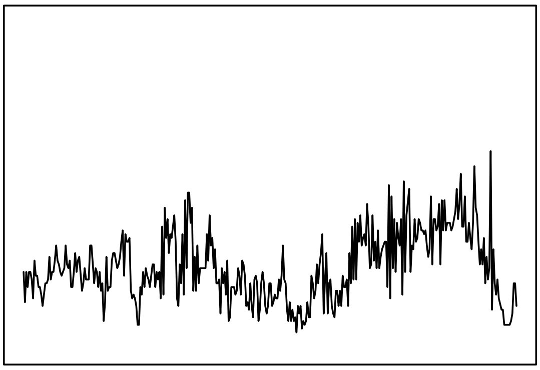
Grafik 10.08: BSB Bimmen, Rhein



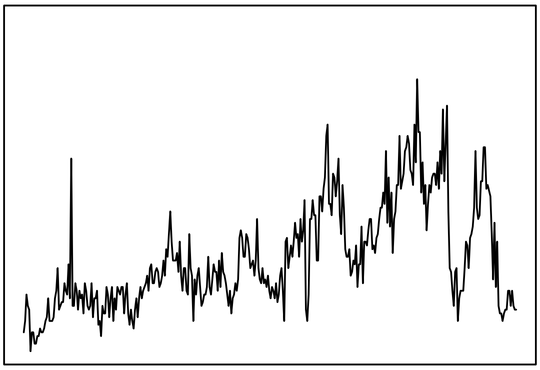
Grafik 10.09: $NO_2$ Bimmen, Rhein



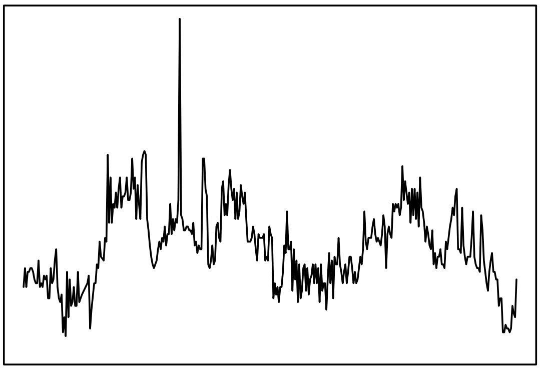
1977



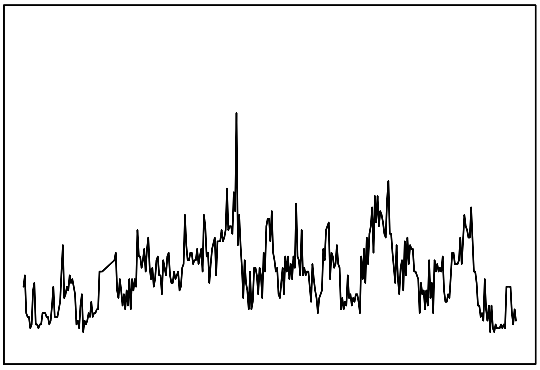
1978



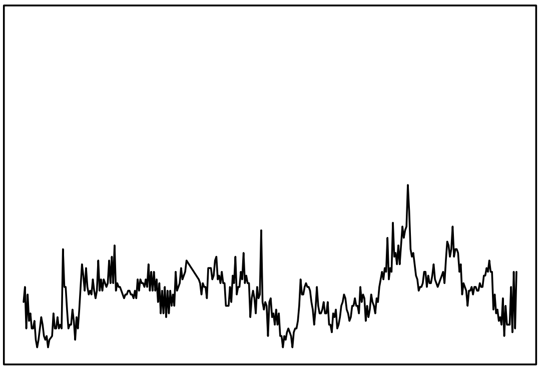
1979



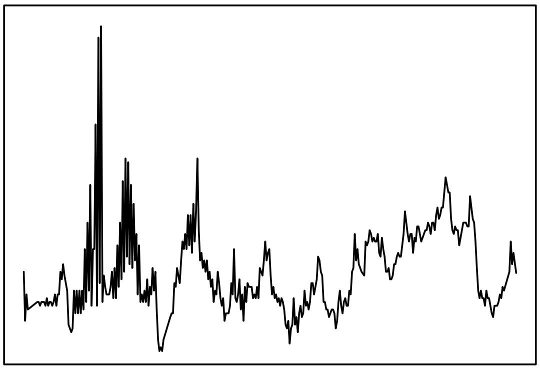
1980



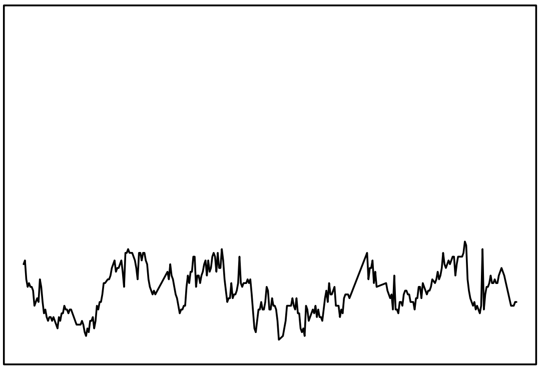
1981



1982

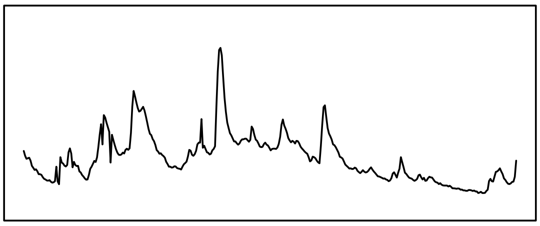


1983

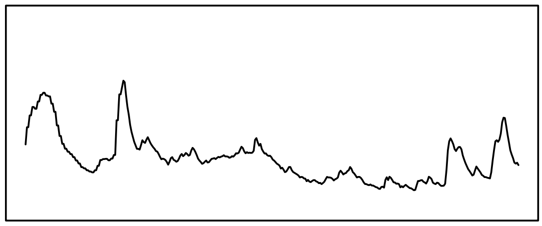


1984

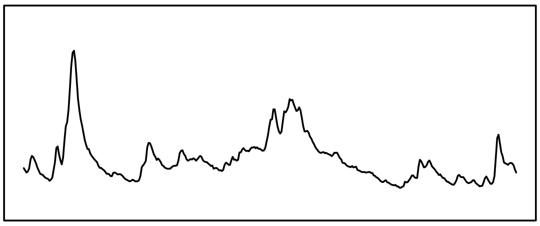
Grafik 10.00b: Q Mainz, Rhein



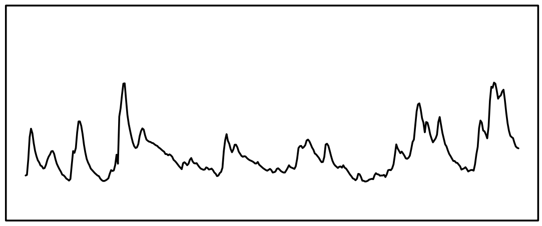
1978



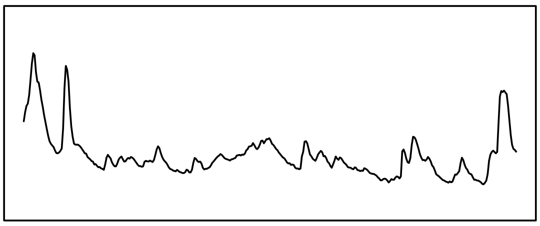
1979



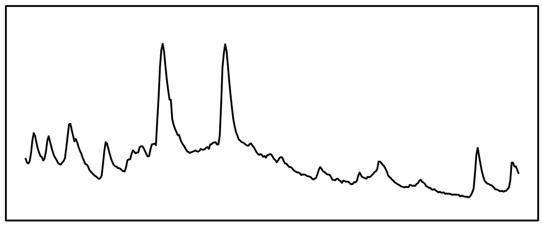
1980



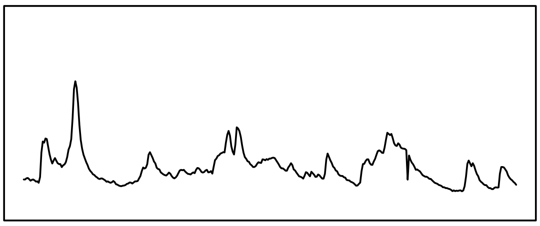
1981



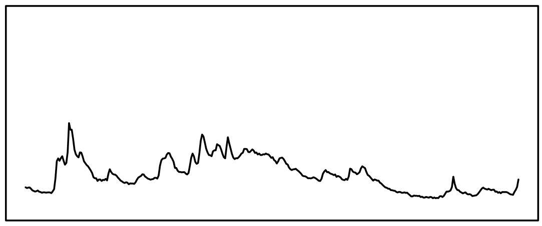
1982



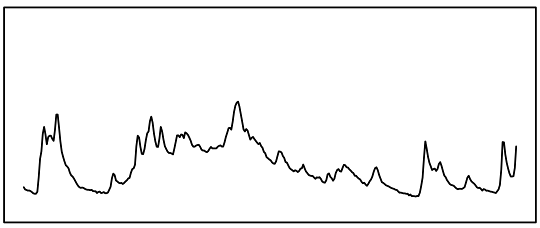
1983



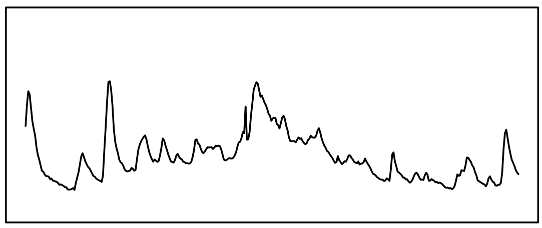
1984



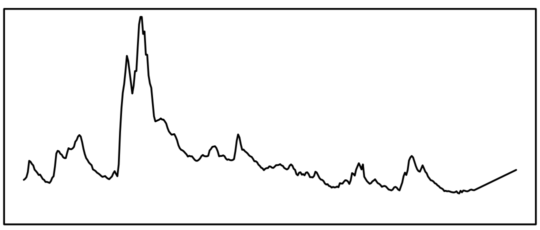
1985



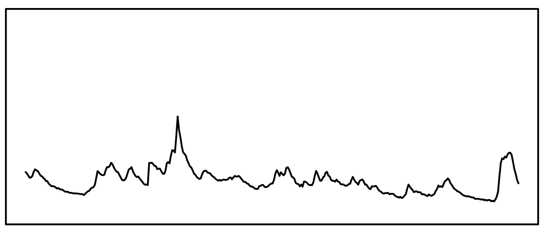
1986



1987

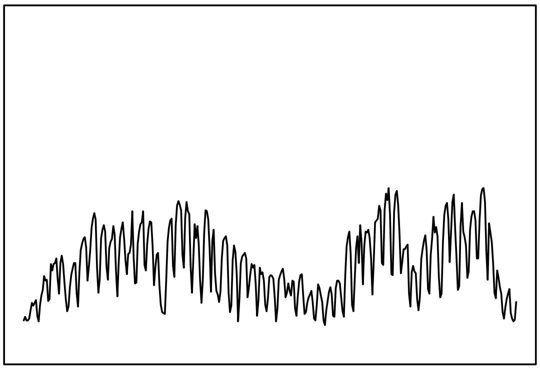


1988

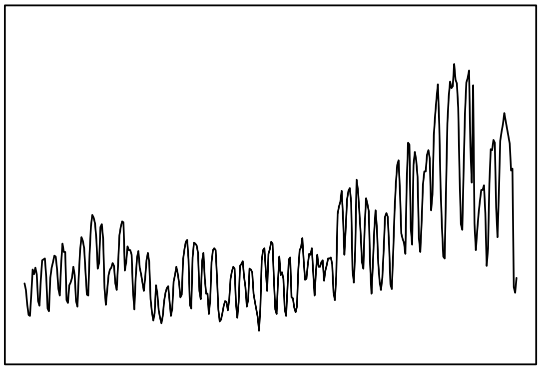


1989

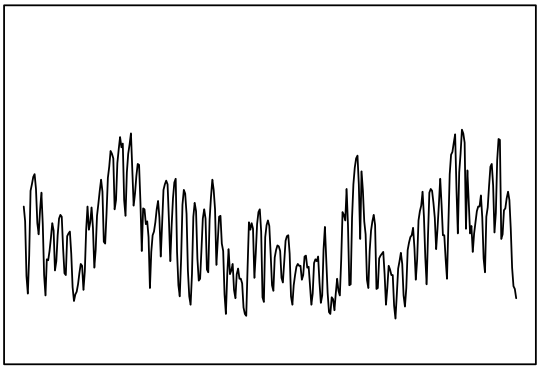
Grafik 10.10: CL Mainz, Rhein
(mit deutlicher Wochenschwingung)



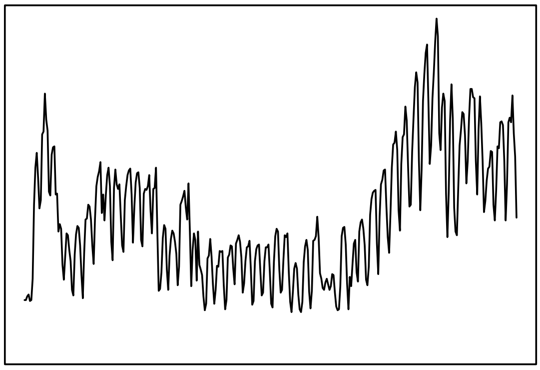
1982



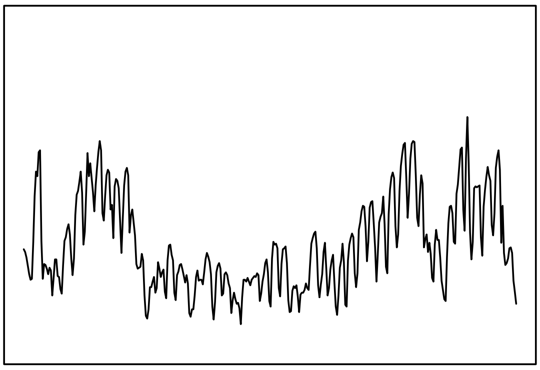
1983



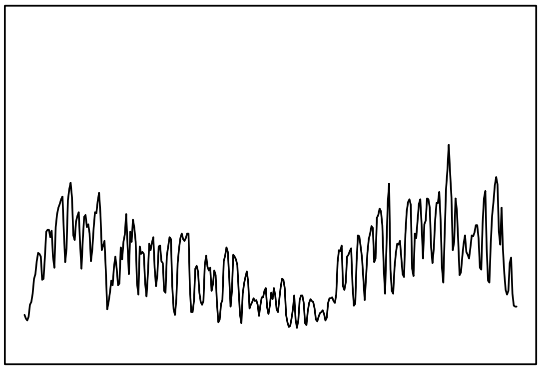
1984



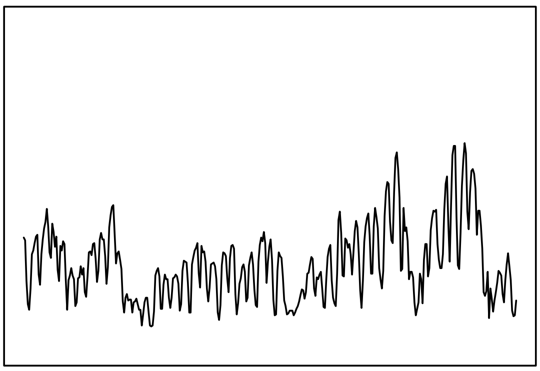
1985



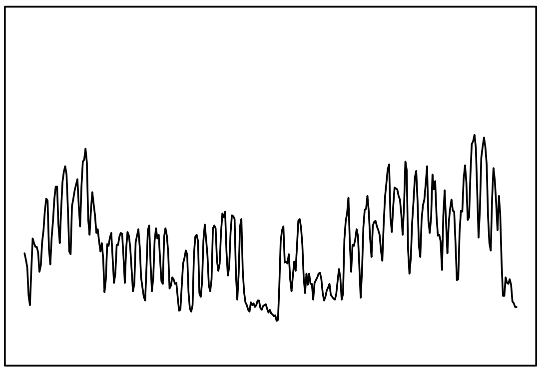
1986



1987

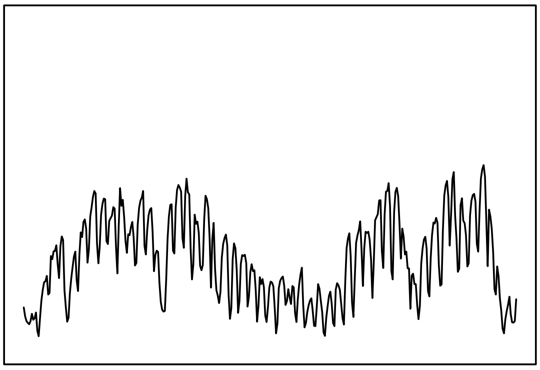


1988

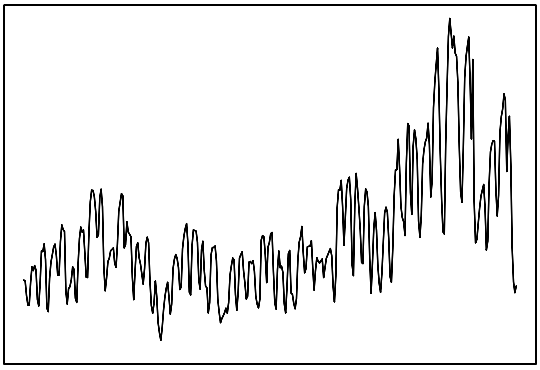


1989

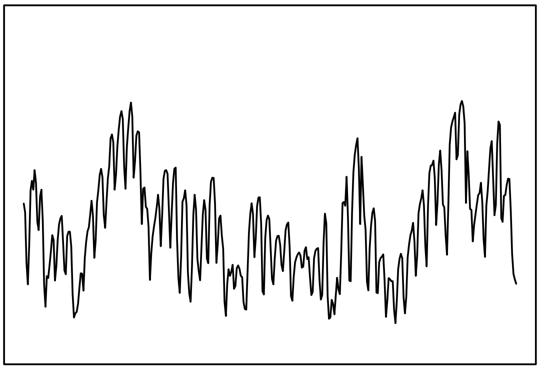
Grafik 10.10a: LF als Modell-Einflussgröße für CL Mainz, Rhein
(mit deutlicher Wochenschwingung)



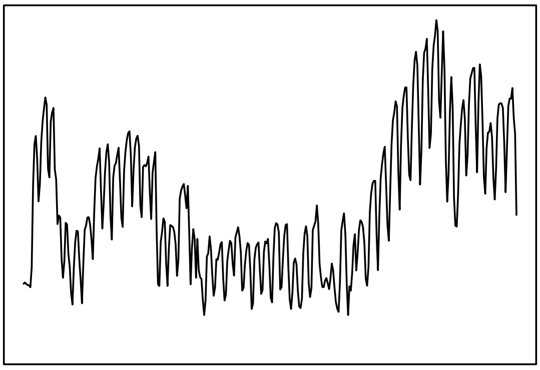
1982



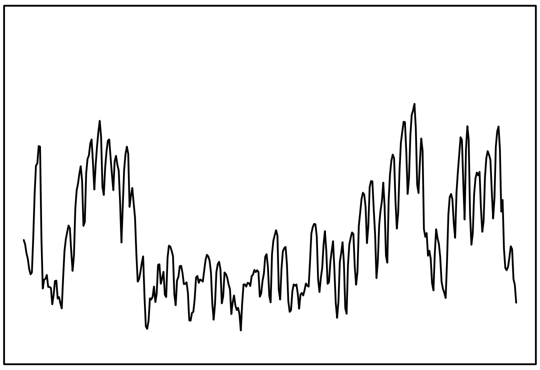
1983



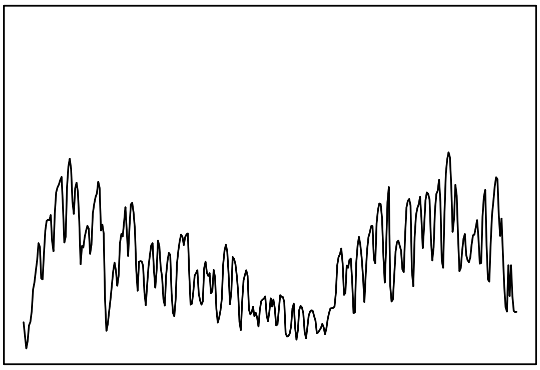
1984



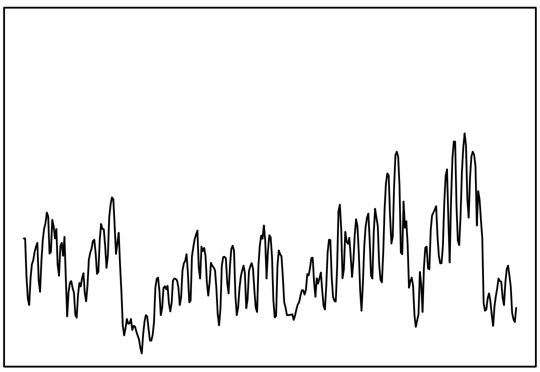
1985



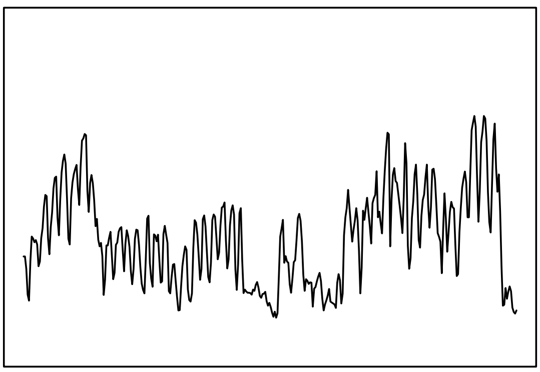
1986



1987

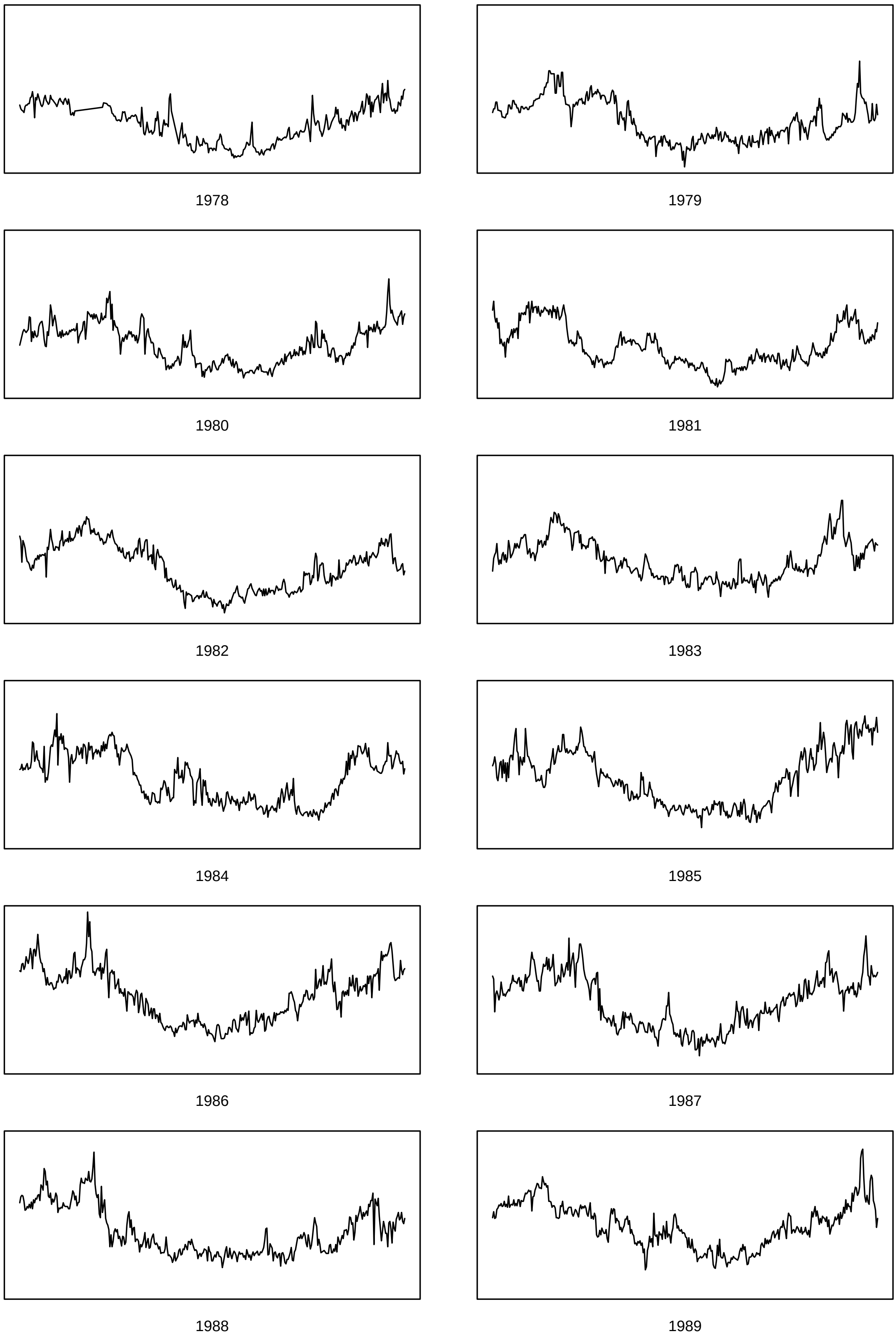


1988

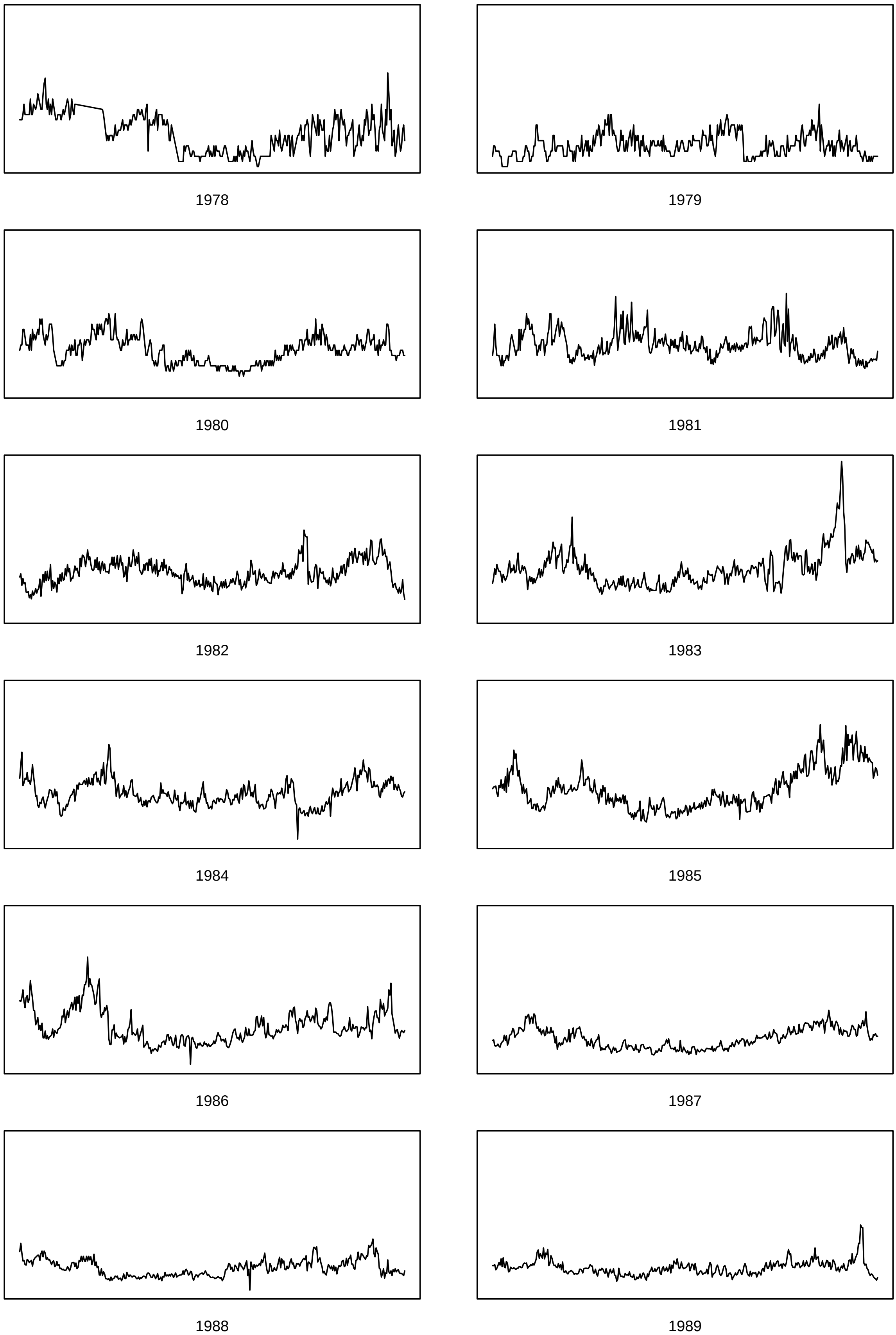


1989

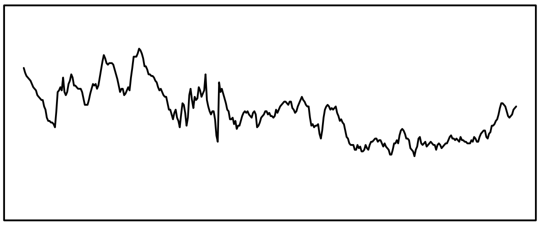
Grafik 10.11: $NO_x$ Mainz, Rhein
(mit erkennbarer Jahresschwingung)



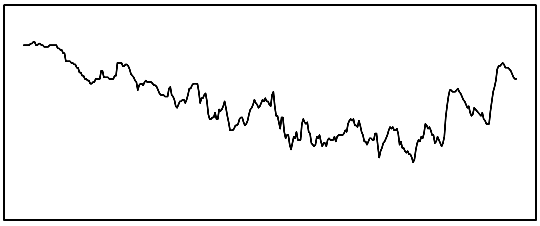
Grafik 10.12: $PO_4$ Mainz, Rhein



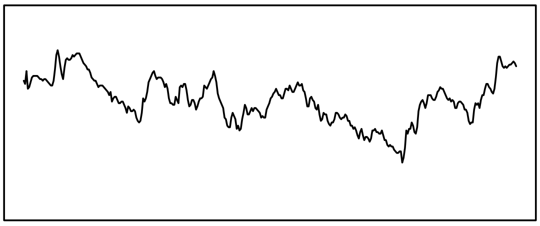
Grafik 10.13: $O_2$ Mainz, Rhein
(mit leichter Jahresschwingung)



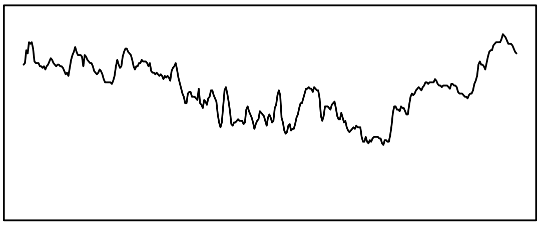
1978



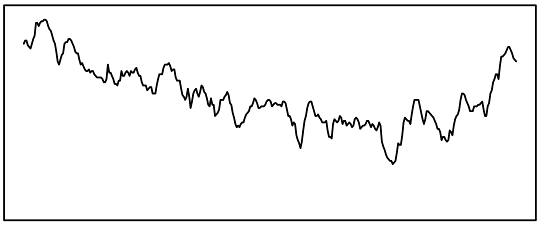
1979



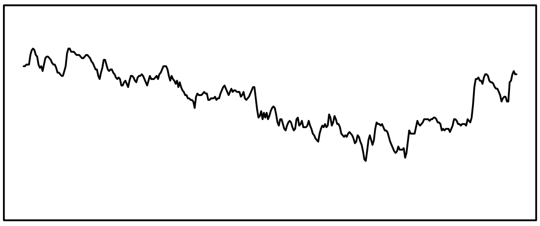
1980



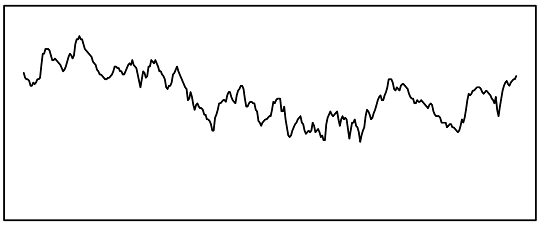
1981



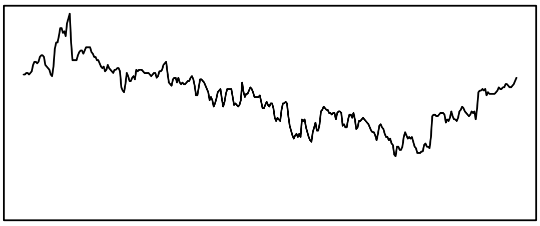
1982



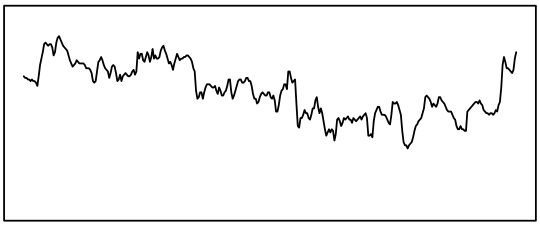
1983



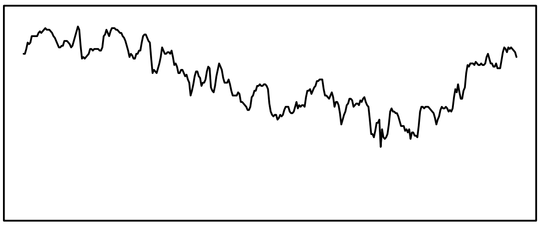
1984



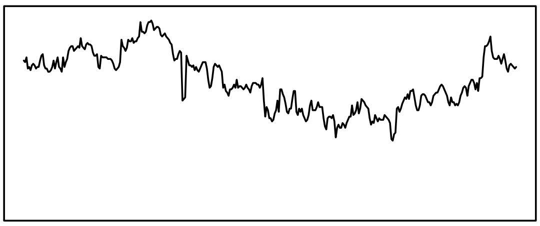
1985



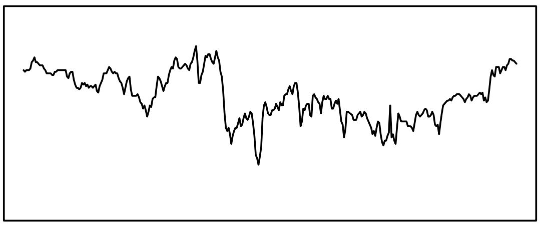
1986



1987

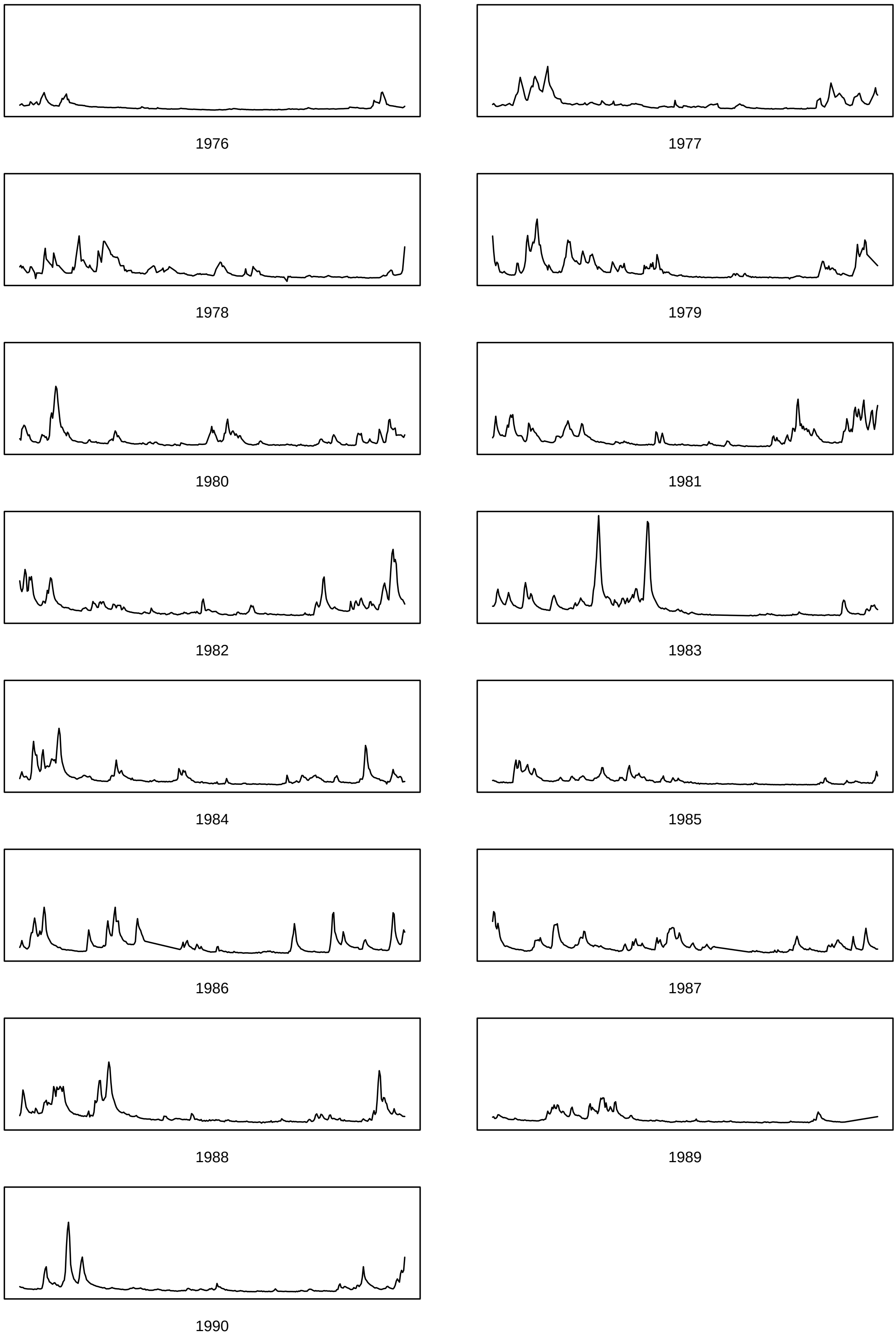


1988

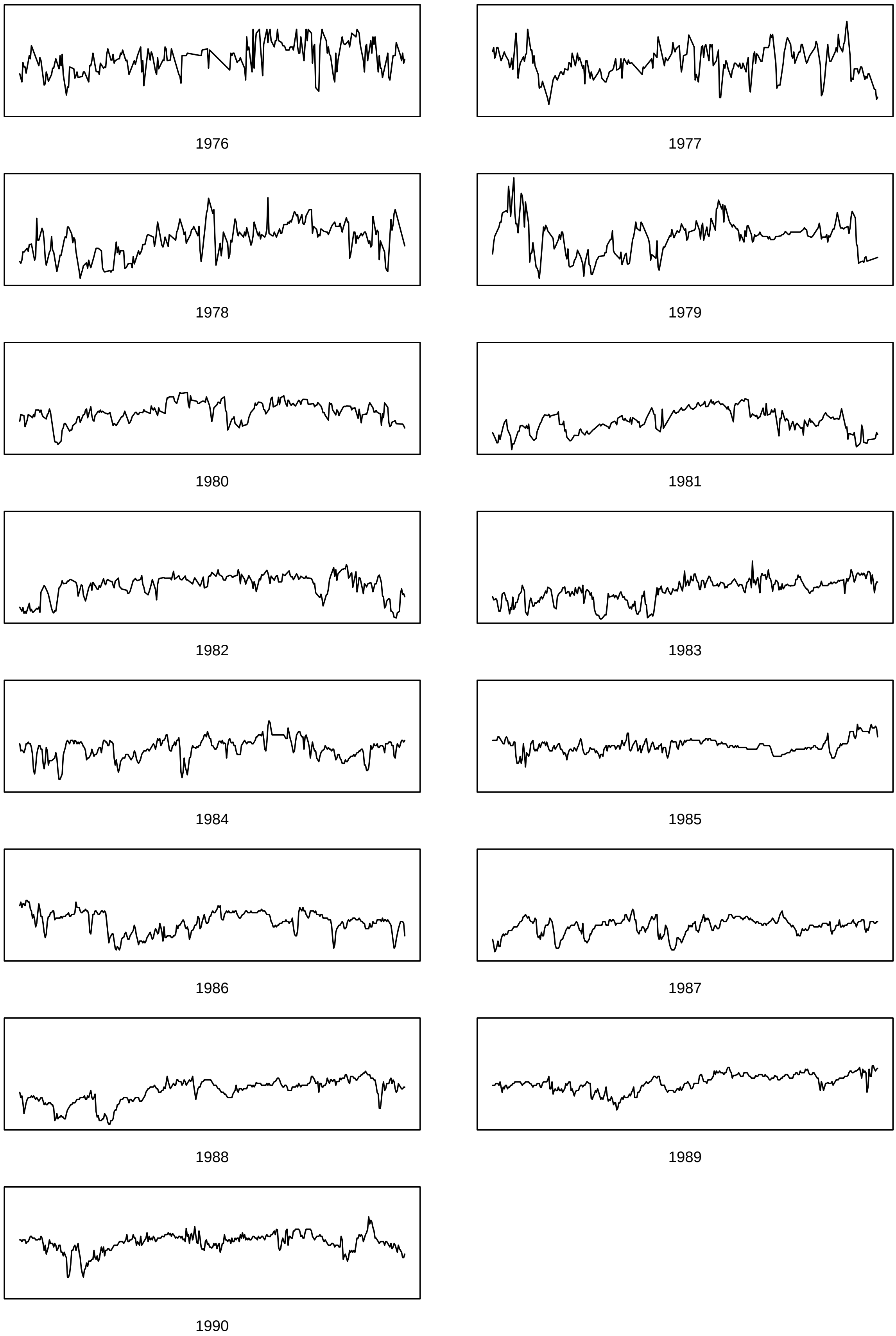


1989

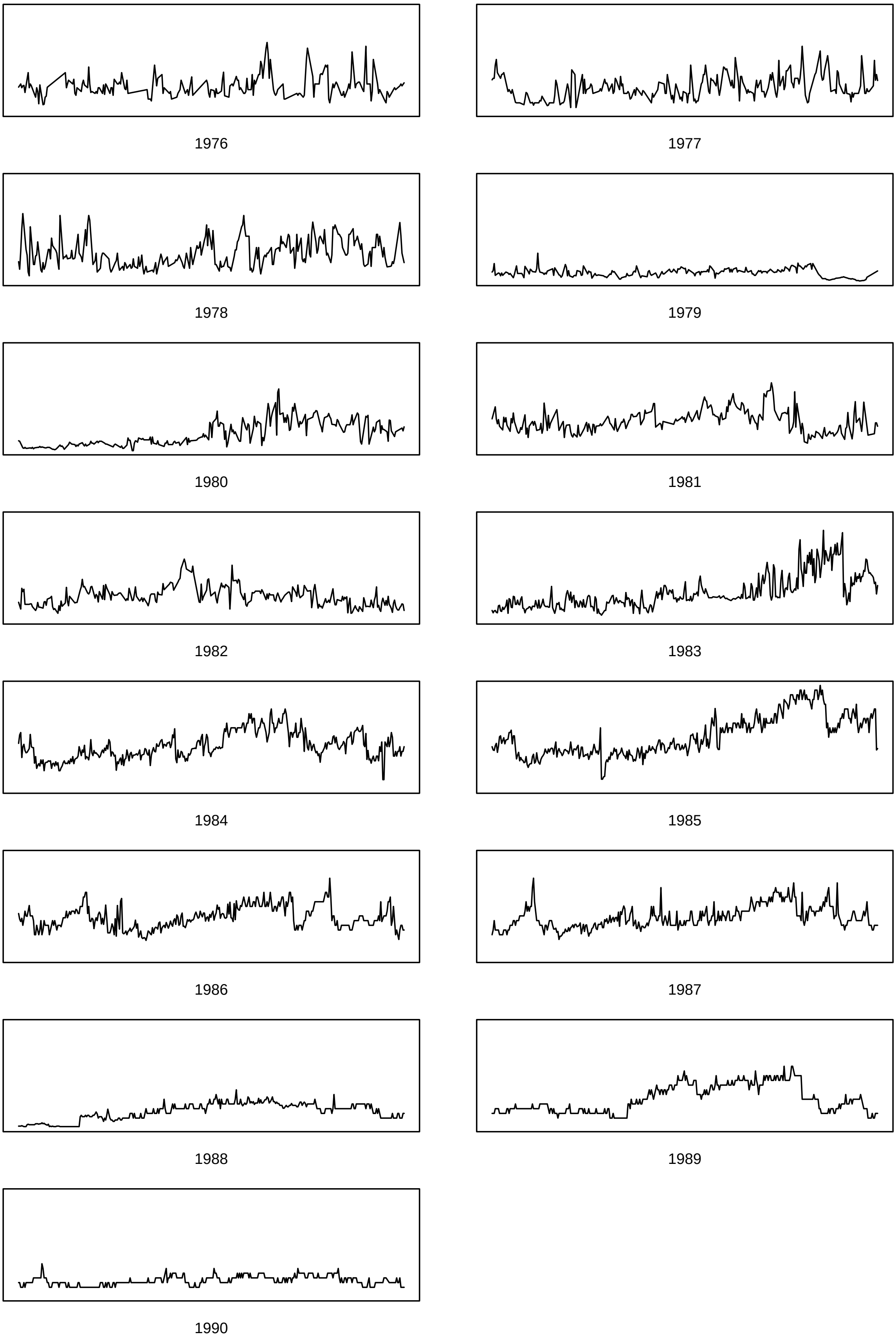
Grafik 10.00c: Q Palzem, Mosel



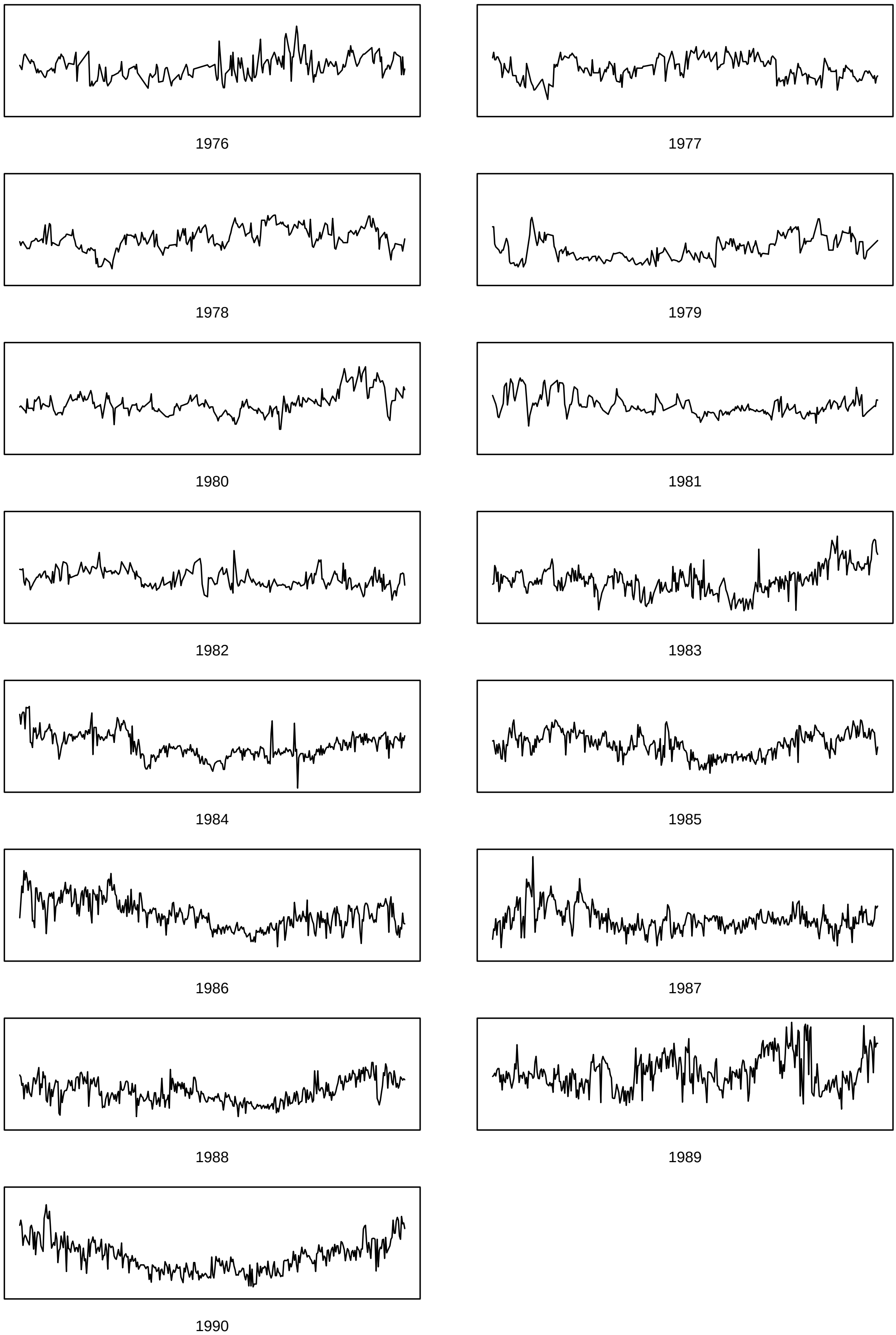
Grafik 10.14: CL Palzem, Mosel



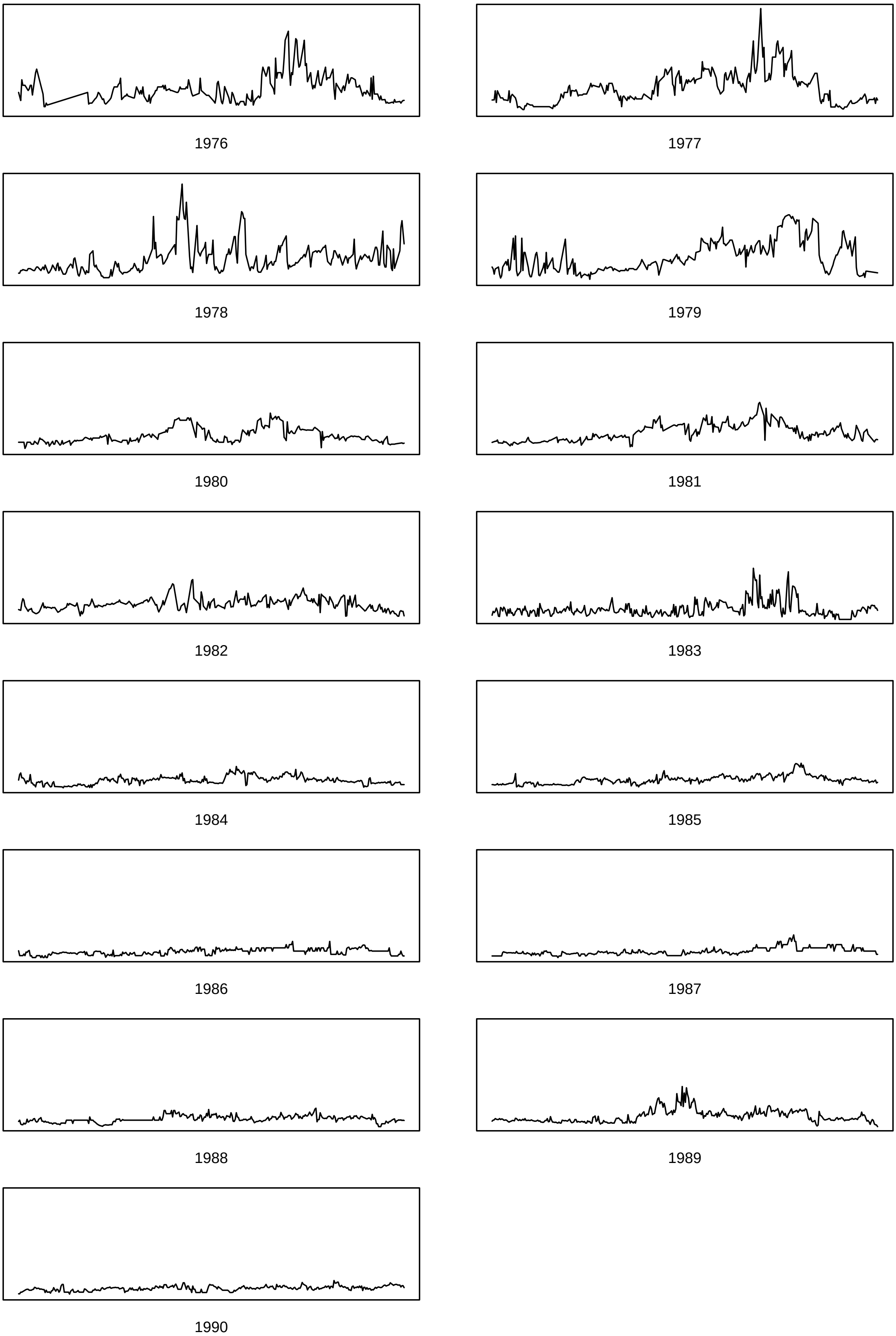
Grafik 10.15: P Palzem, Mosel



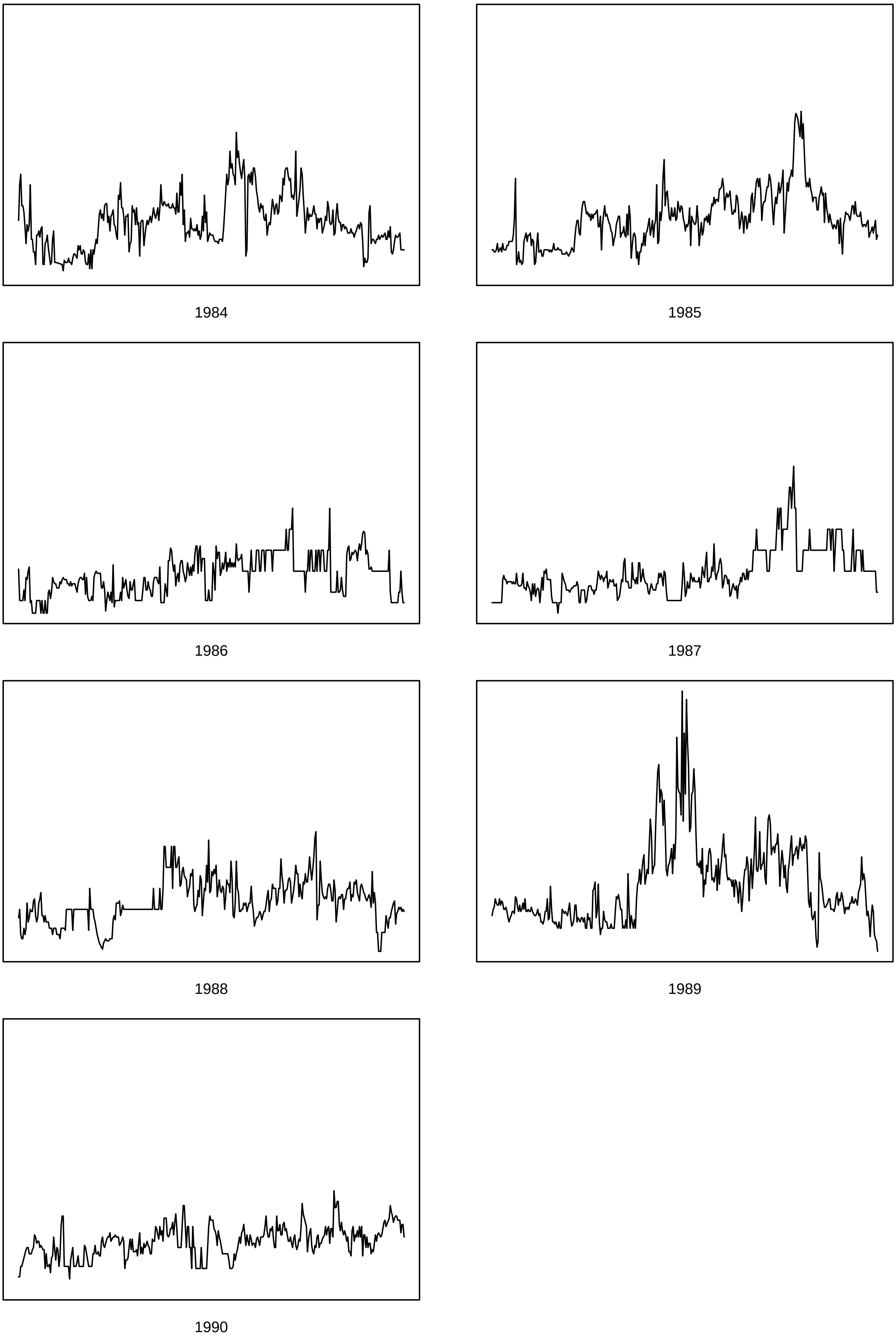
Grafik 10.16: $NO_3$ Palzem, Mosel



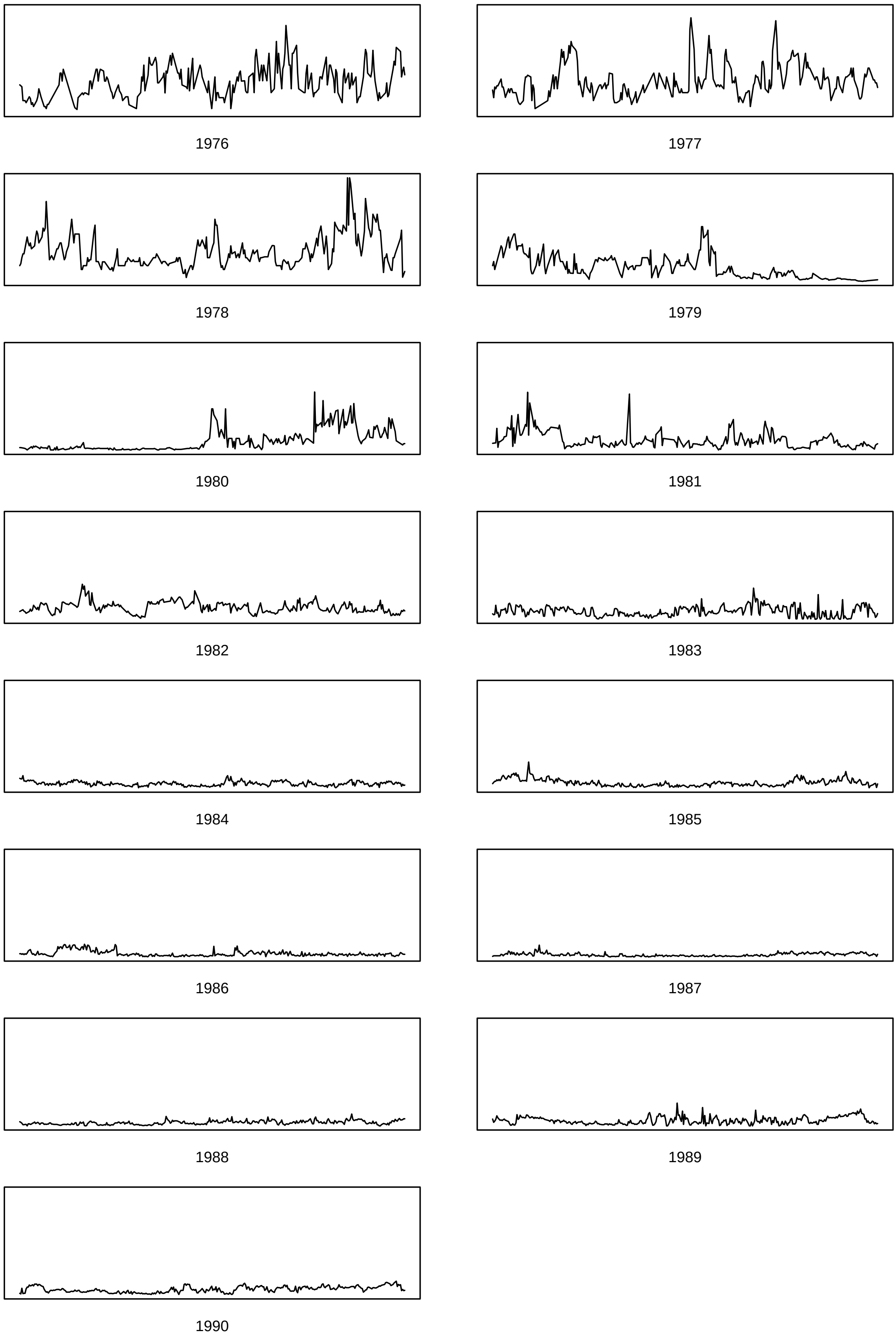
Grafik 10.17: $NO_2$ Palzem, Mosel



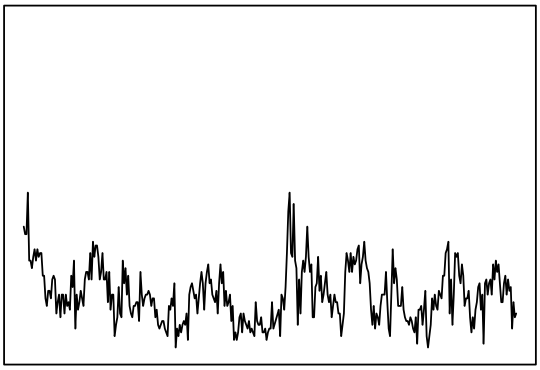
Grafik 10.17a: $NO_2$ 84 – 90 Palzem, Mosel



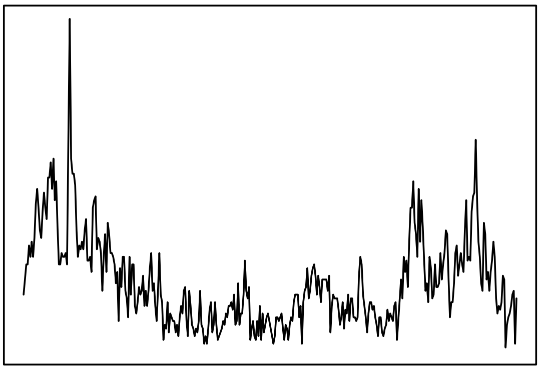
Grafik 10.18: $NH_4$ Palzem, Mosel



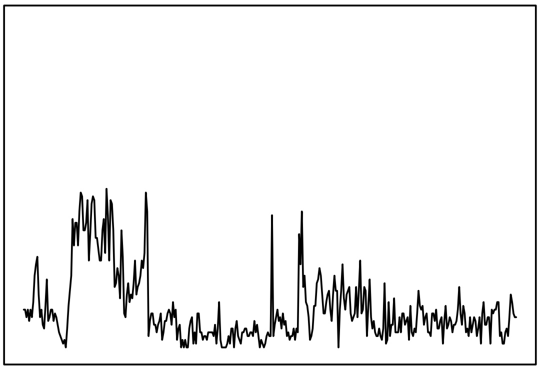
Grafik 10.18a: $NH_4$ 84 – 90 Palzem, Mosel



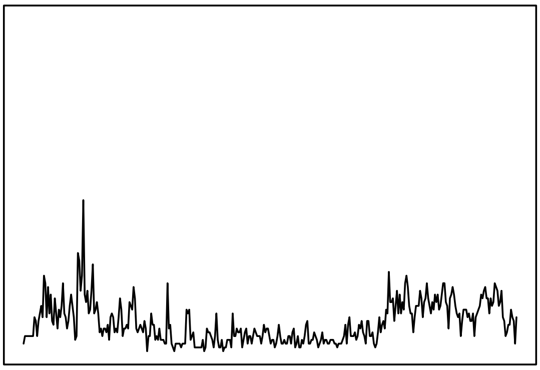
1984



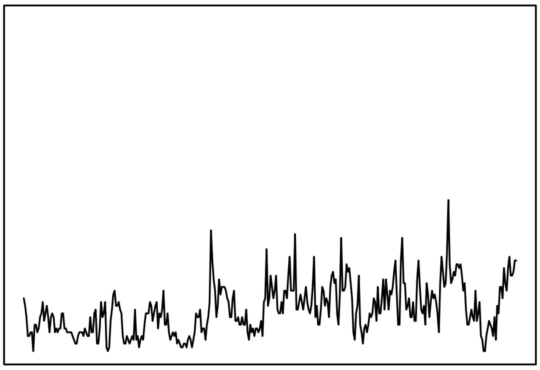
1985



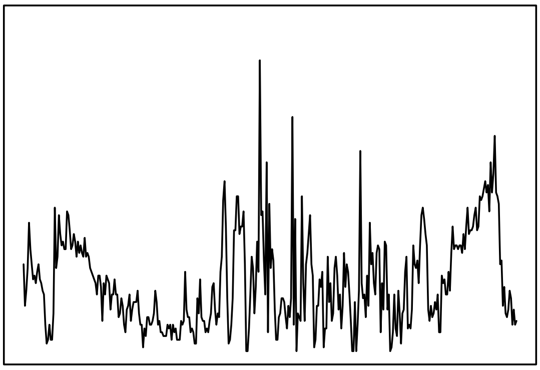
1986



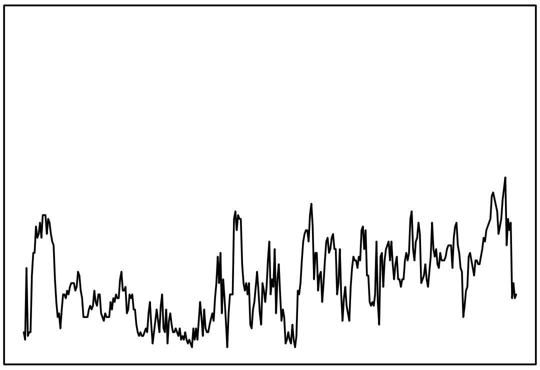
1987



1988



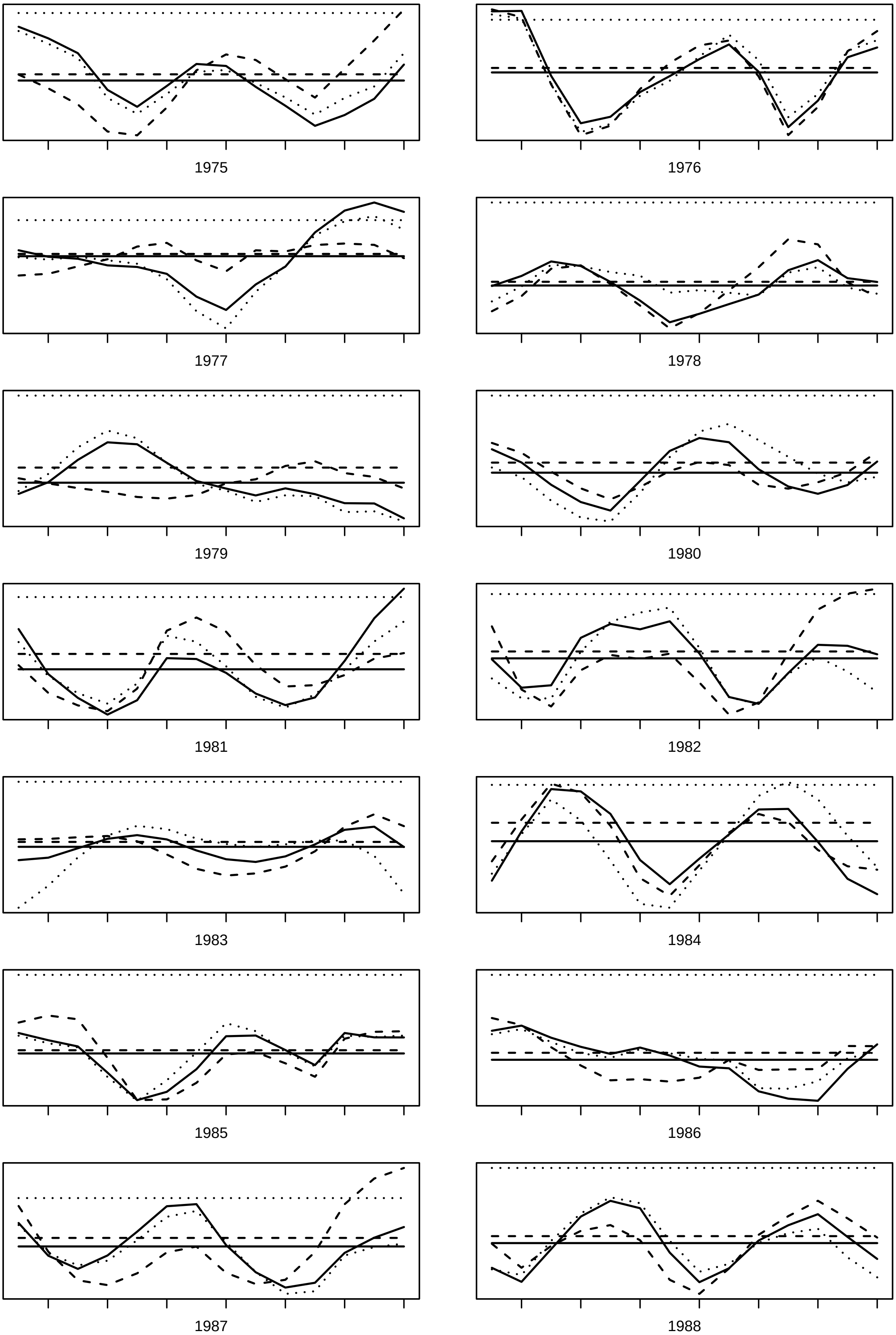
1989



1990

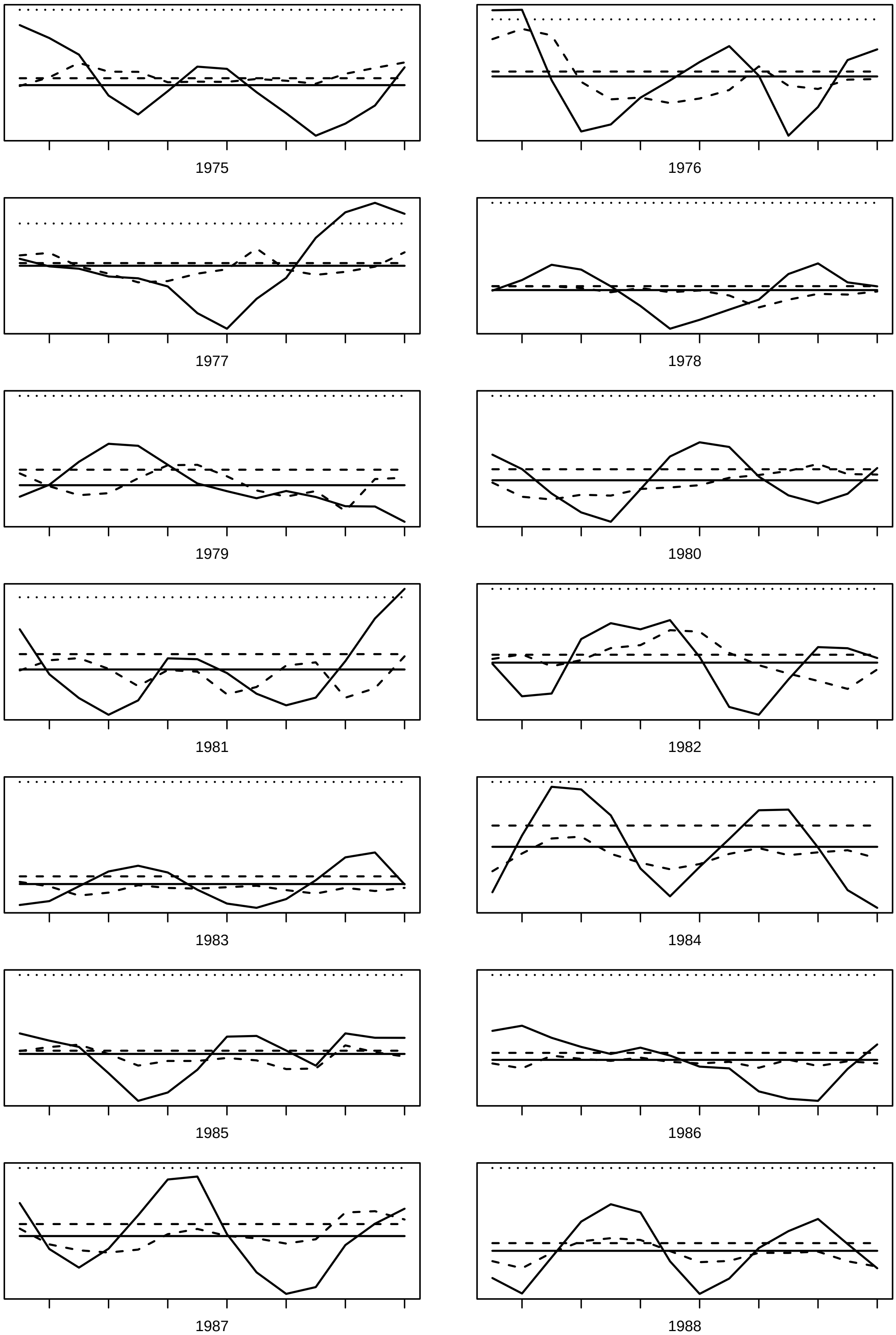
Grafik 11.01: CL Tagesmittelwerte Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$.......

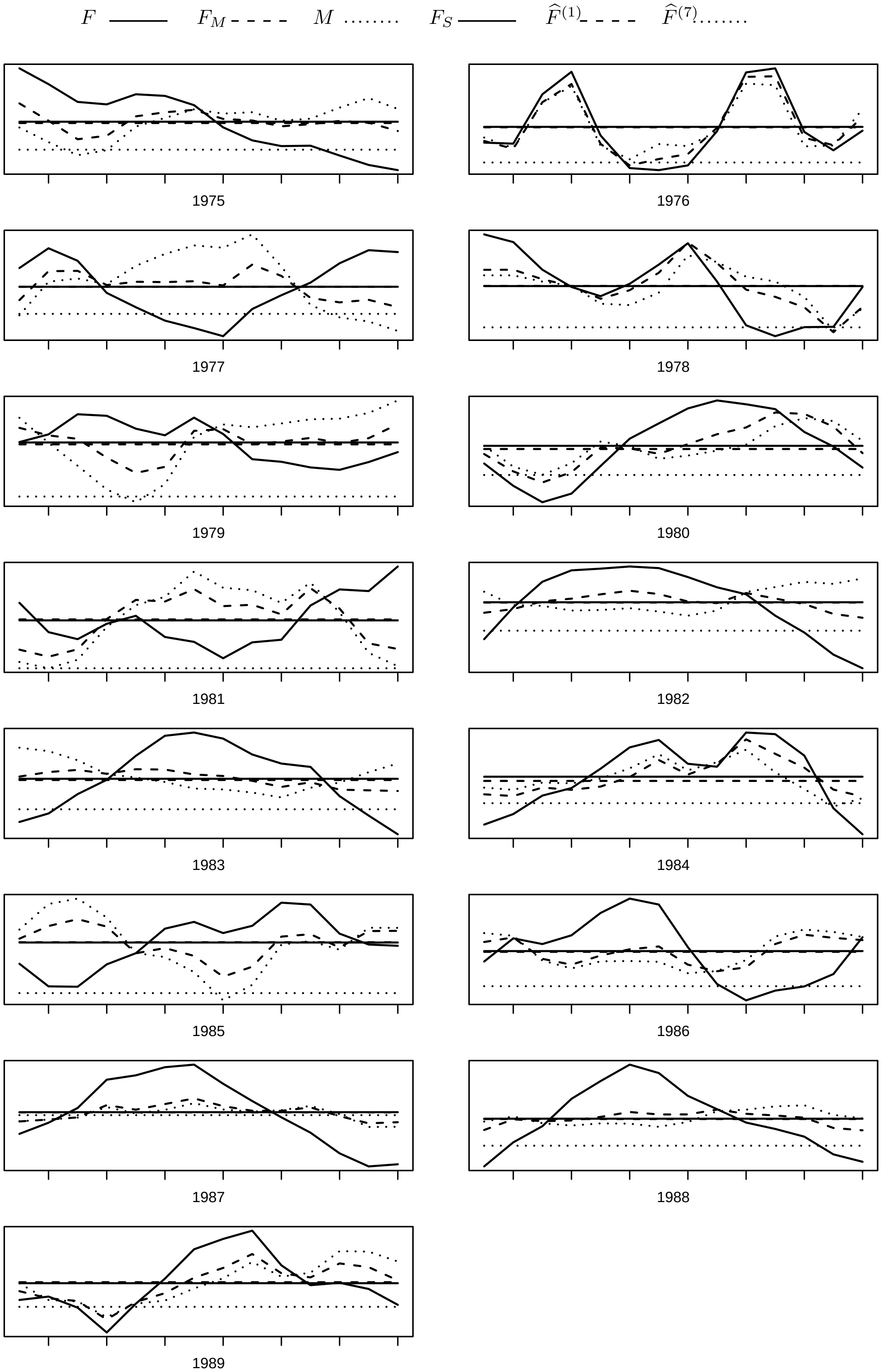


Grafik 11.01a: CL mit LF als Einflussgröße, Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(7a)}$ - - -

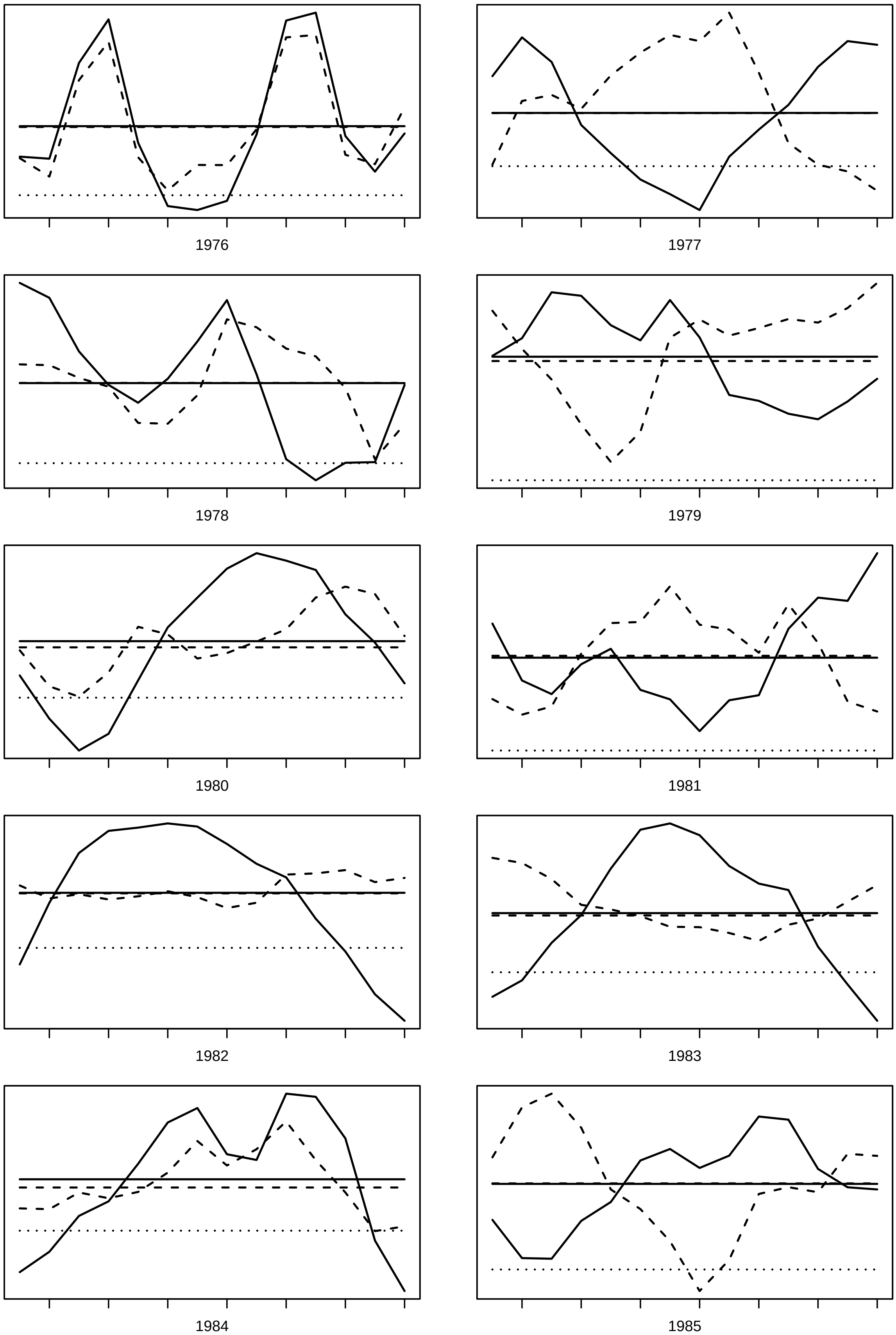


Grafik 11.02: $O_2$ Bimmen, Rhein



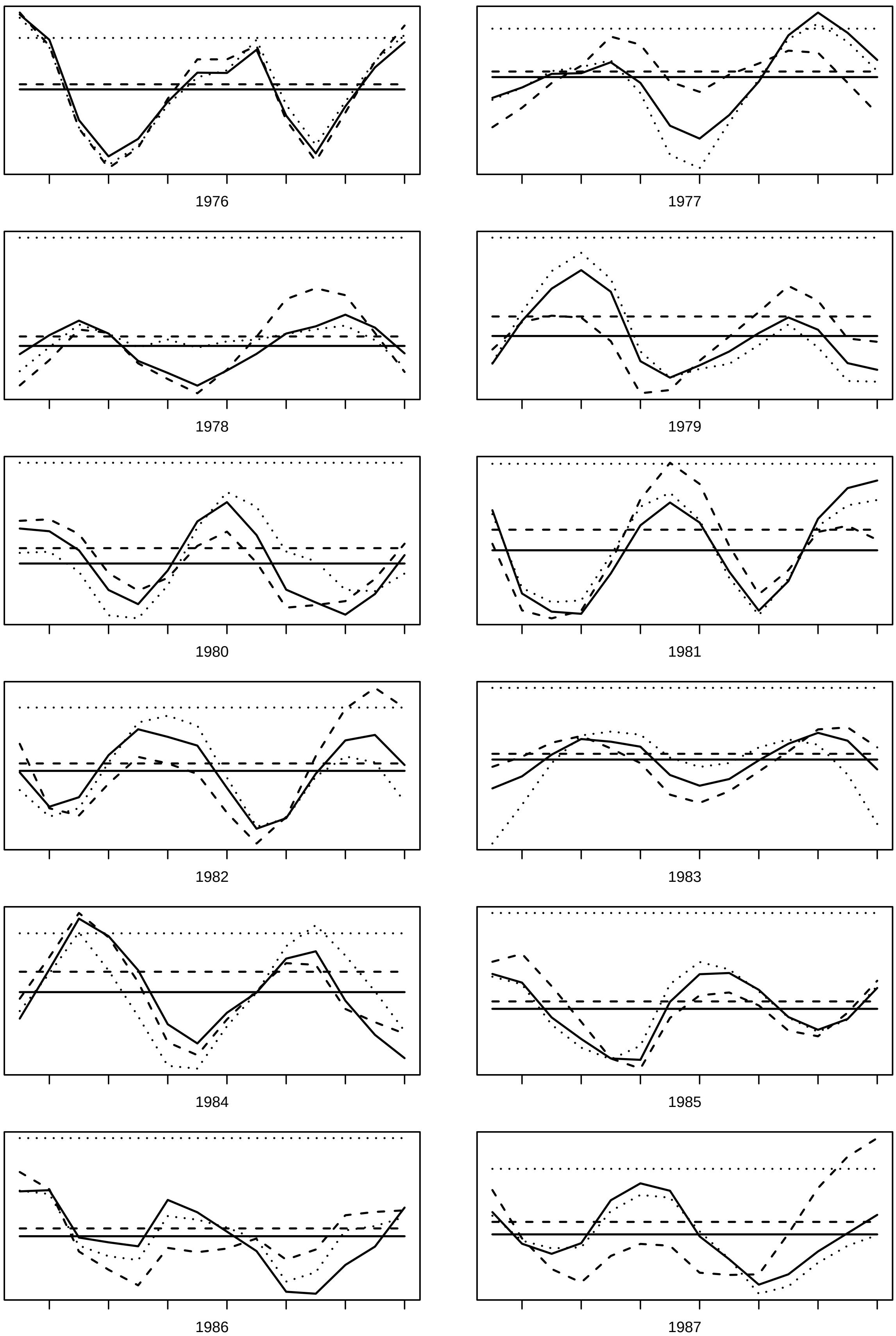
Grafik 11.02a: $O_2$ mit Temperatur TP als Einflussgröße, Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(7a)}$ - - - -

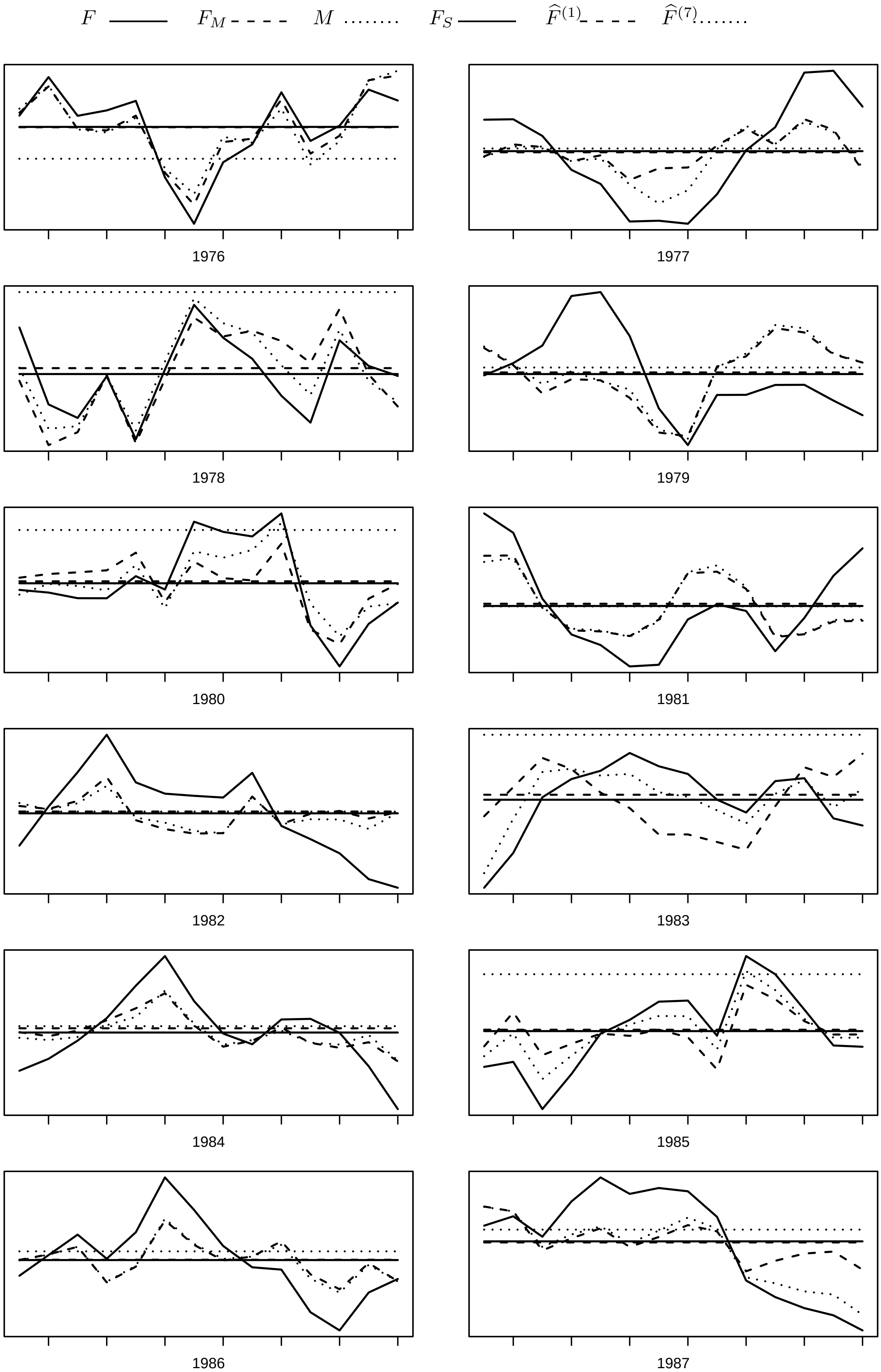


Grafik 11.03: CL Tagesmischproben Bimmen, Rhein

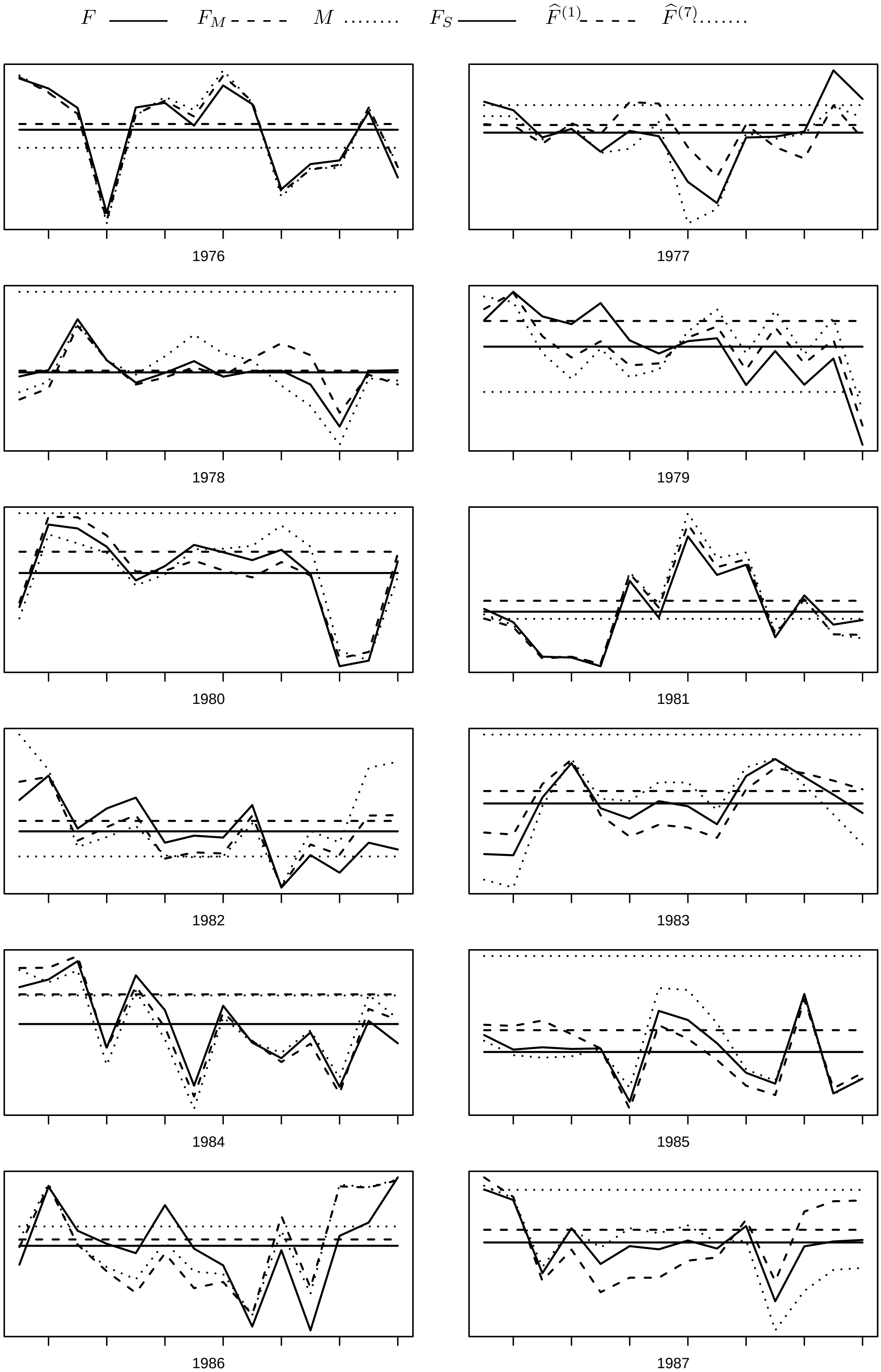
$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$ .......



## Grafik 11.04: $NO_3$ Bimmen, Rhein

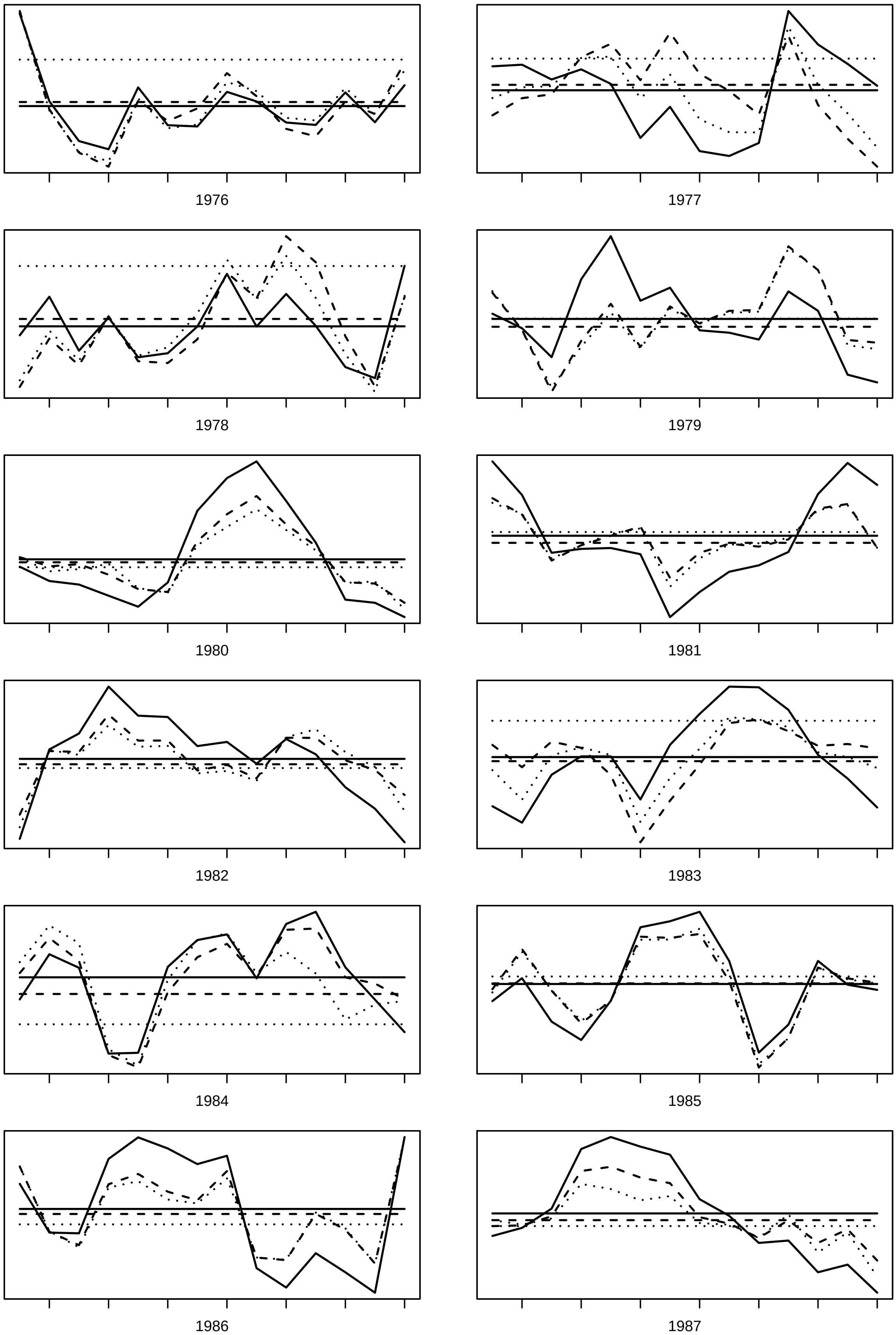


Grafik 11.05: $NH_4$ Bimmen, Rhein



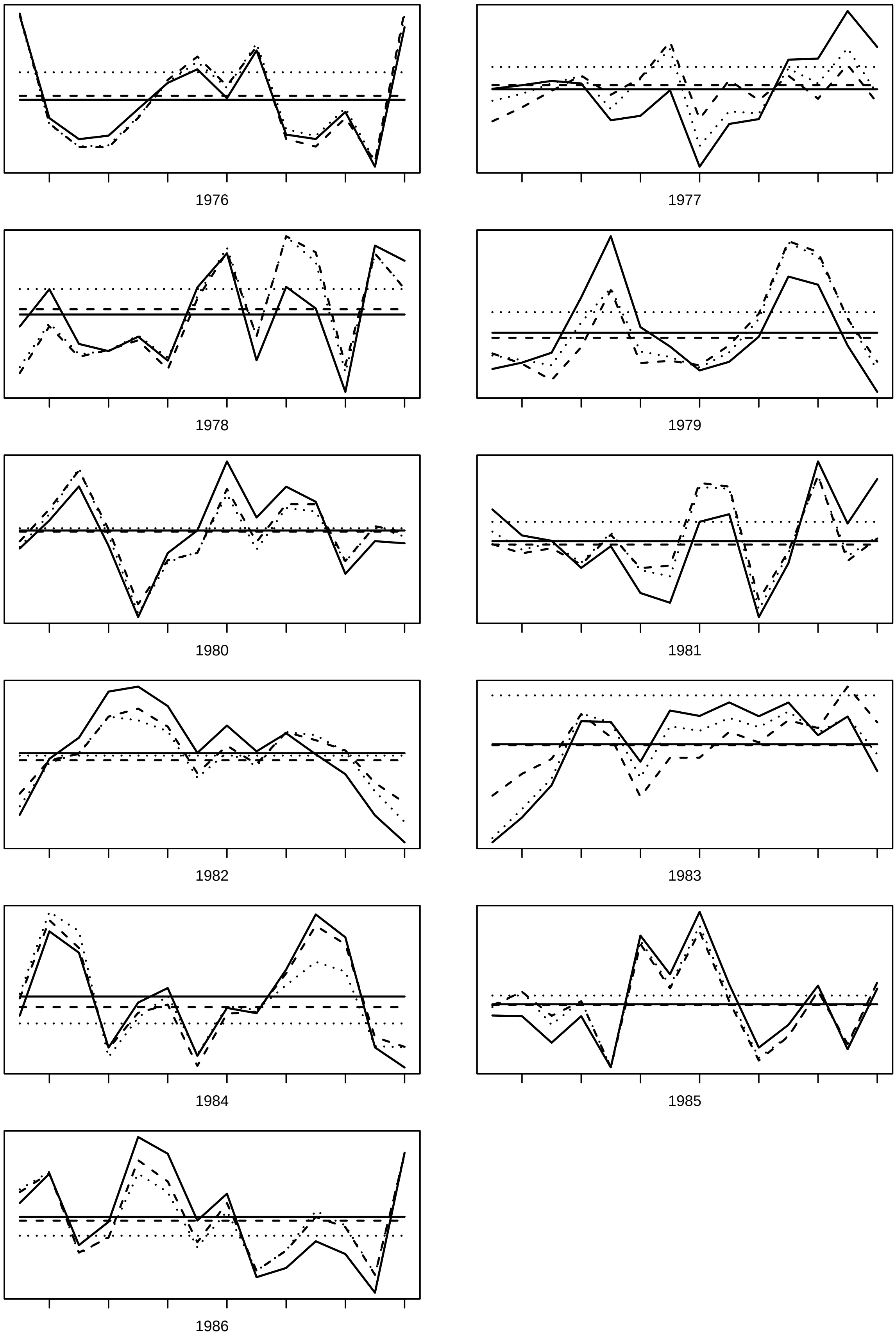
Grafik 11.06: $KMnO_4$ Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ …….. $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$…….



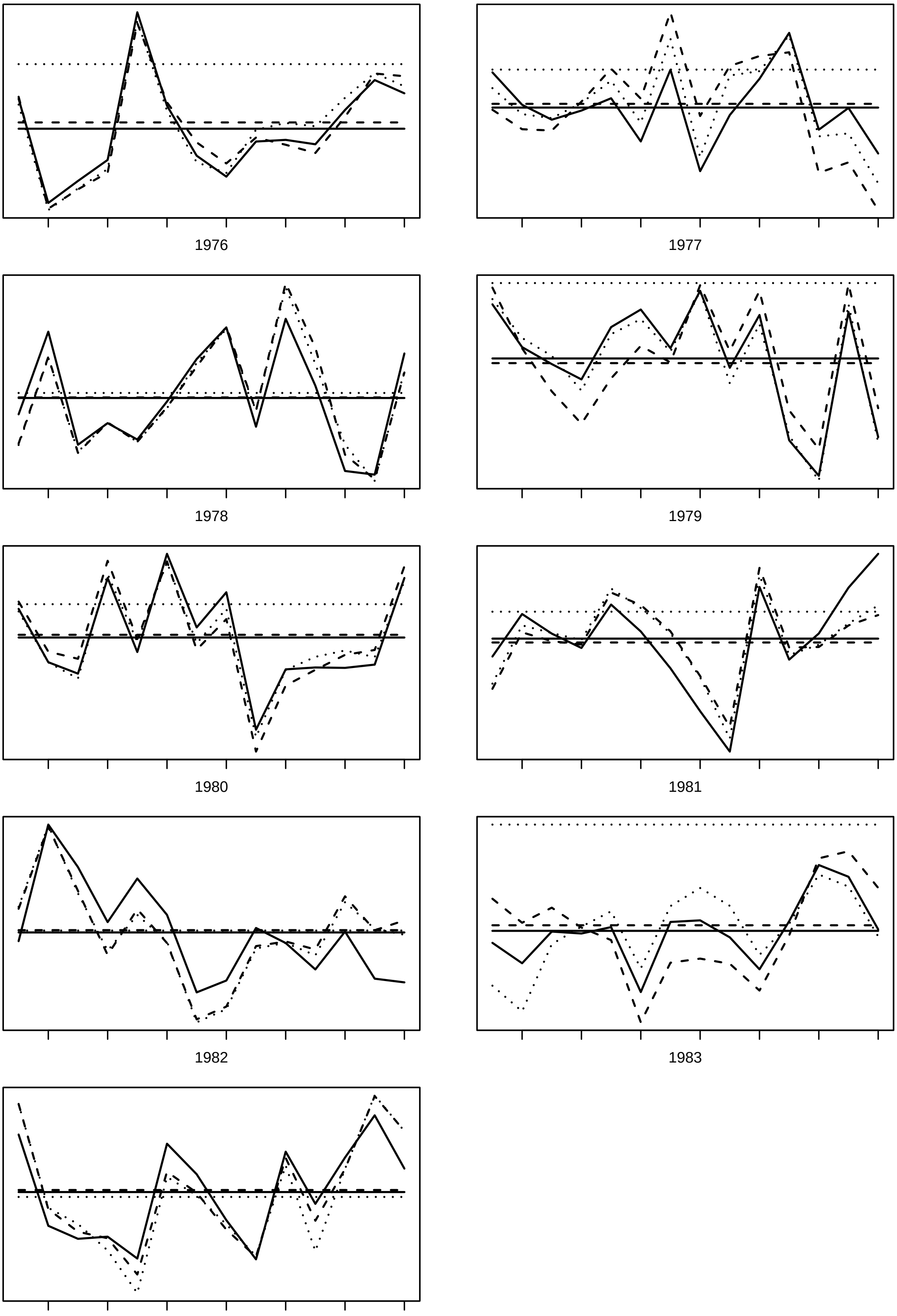
Grafik 11.07: CSB Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$.......



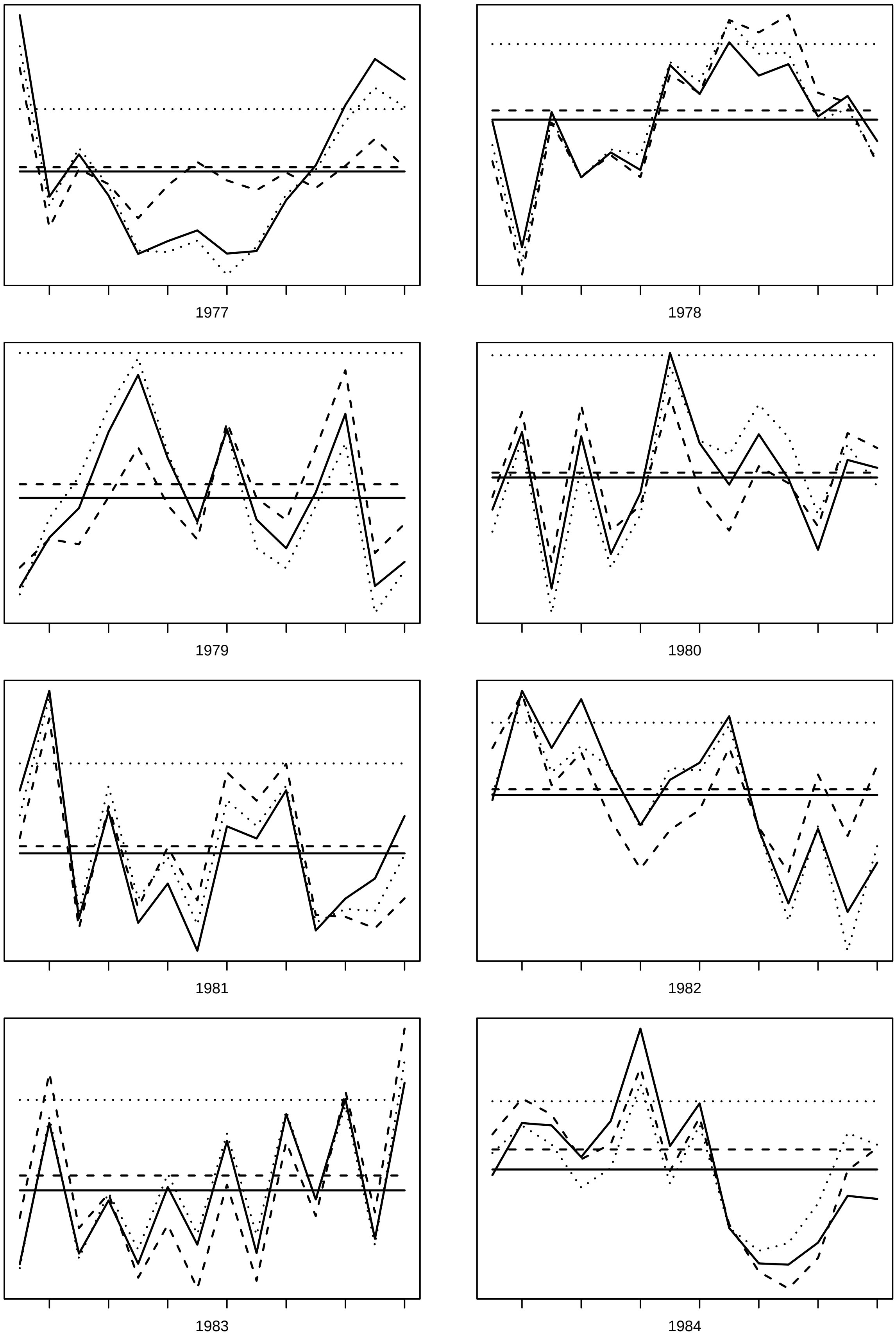
Grafik 11.08: BSB Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$.......



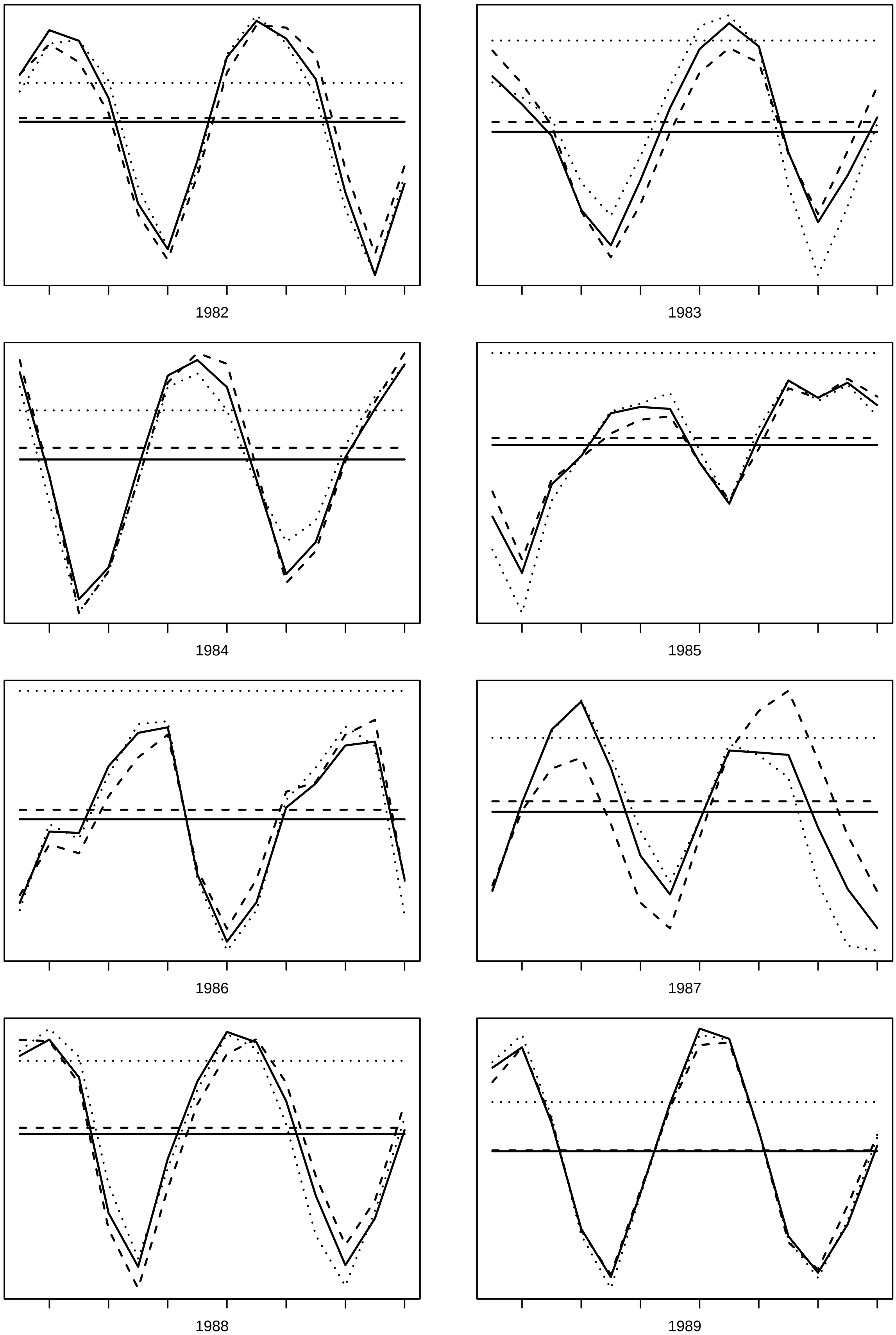
Grafik 11.09: $NO_2$ Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$- - - - $\widehat{F}^{(7)}$.......



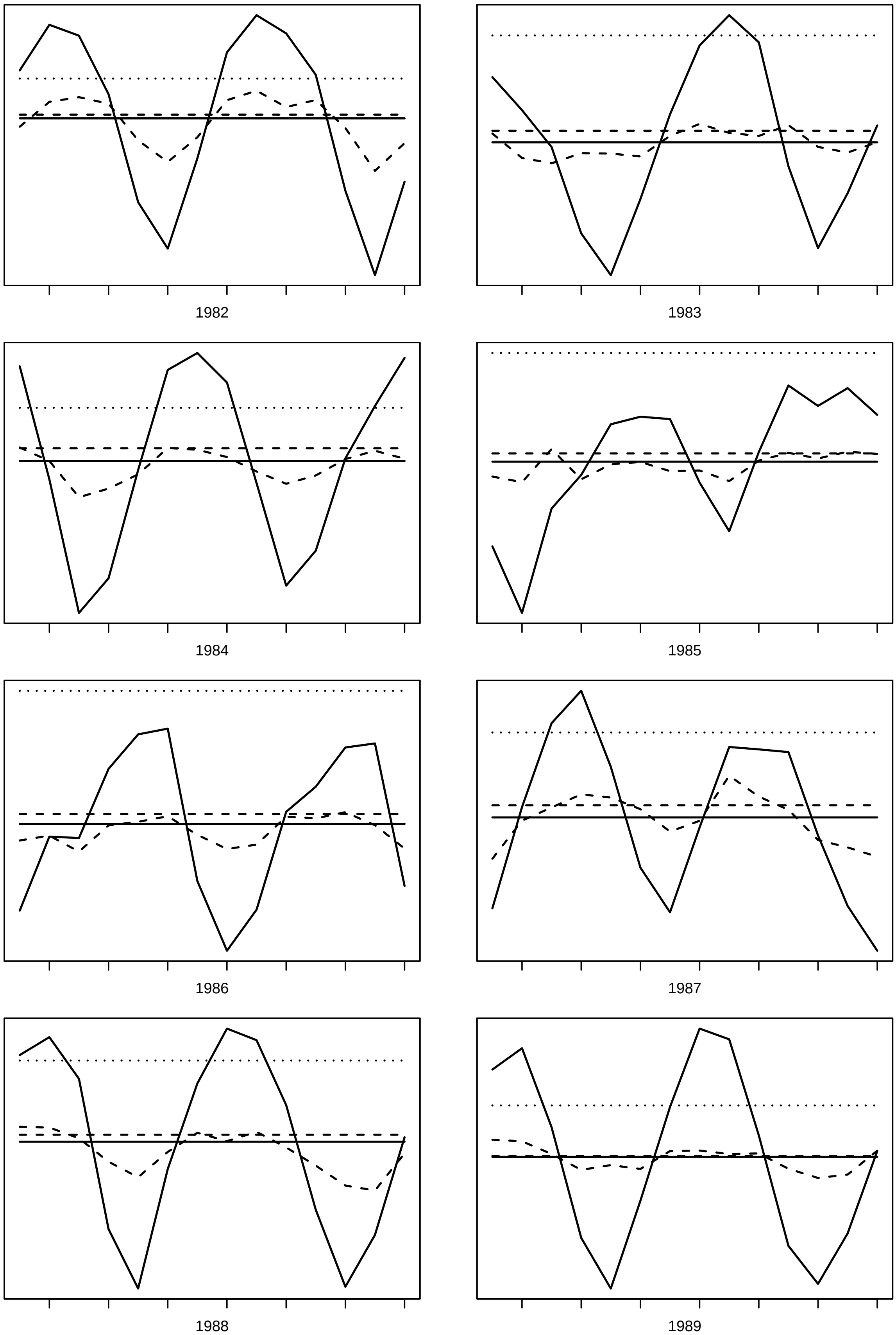
Grafik 11.10: CL Mainz, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$ .......



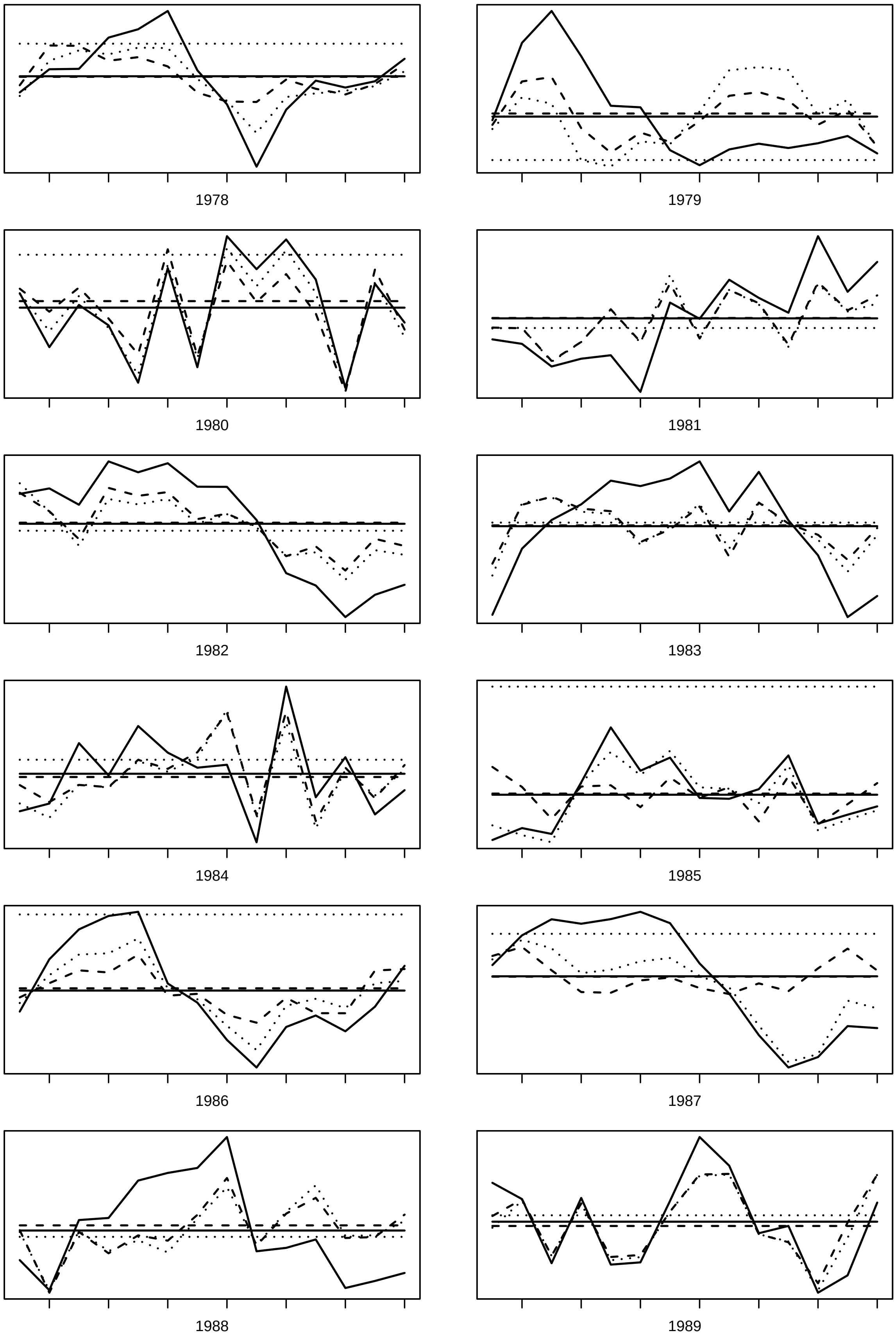
Grafik 11.10a: CL mit LF als Einflussgröße, Mainz, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(7a)}$ - - -



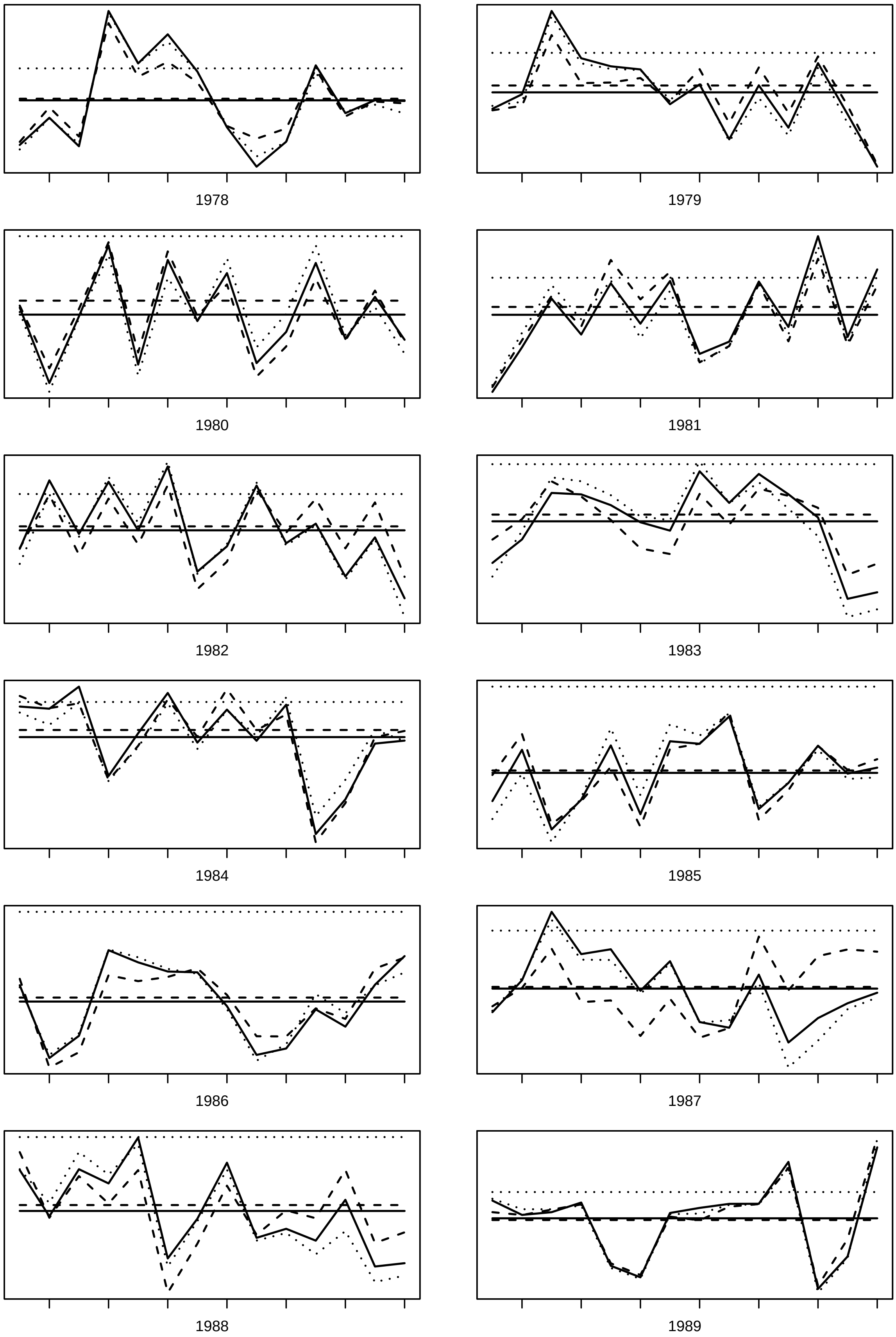
Grafik 11.11: $NO_x$ Mainz, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$.......



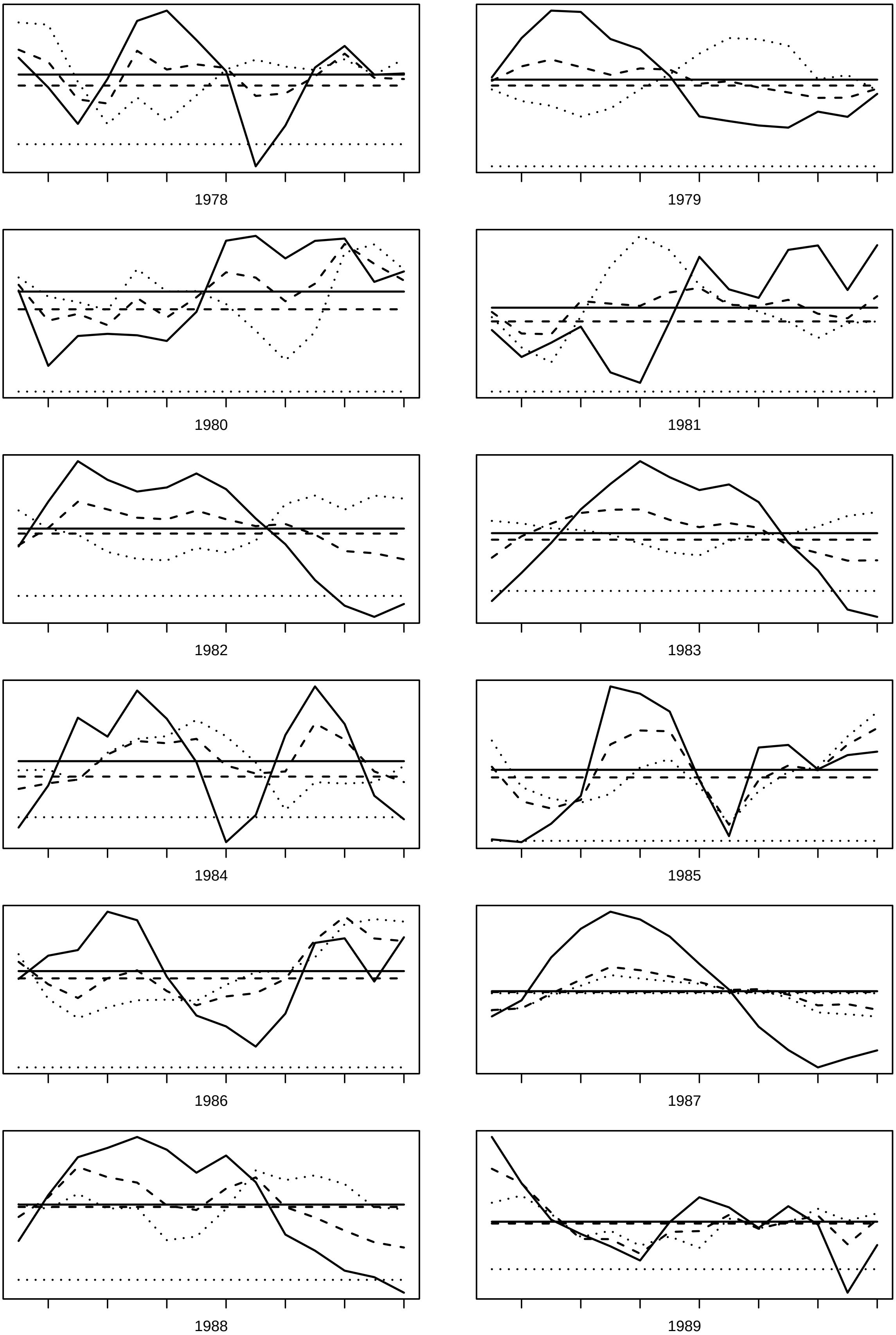
Grafik 11.12: $PO_4$ Mainz, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$.......



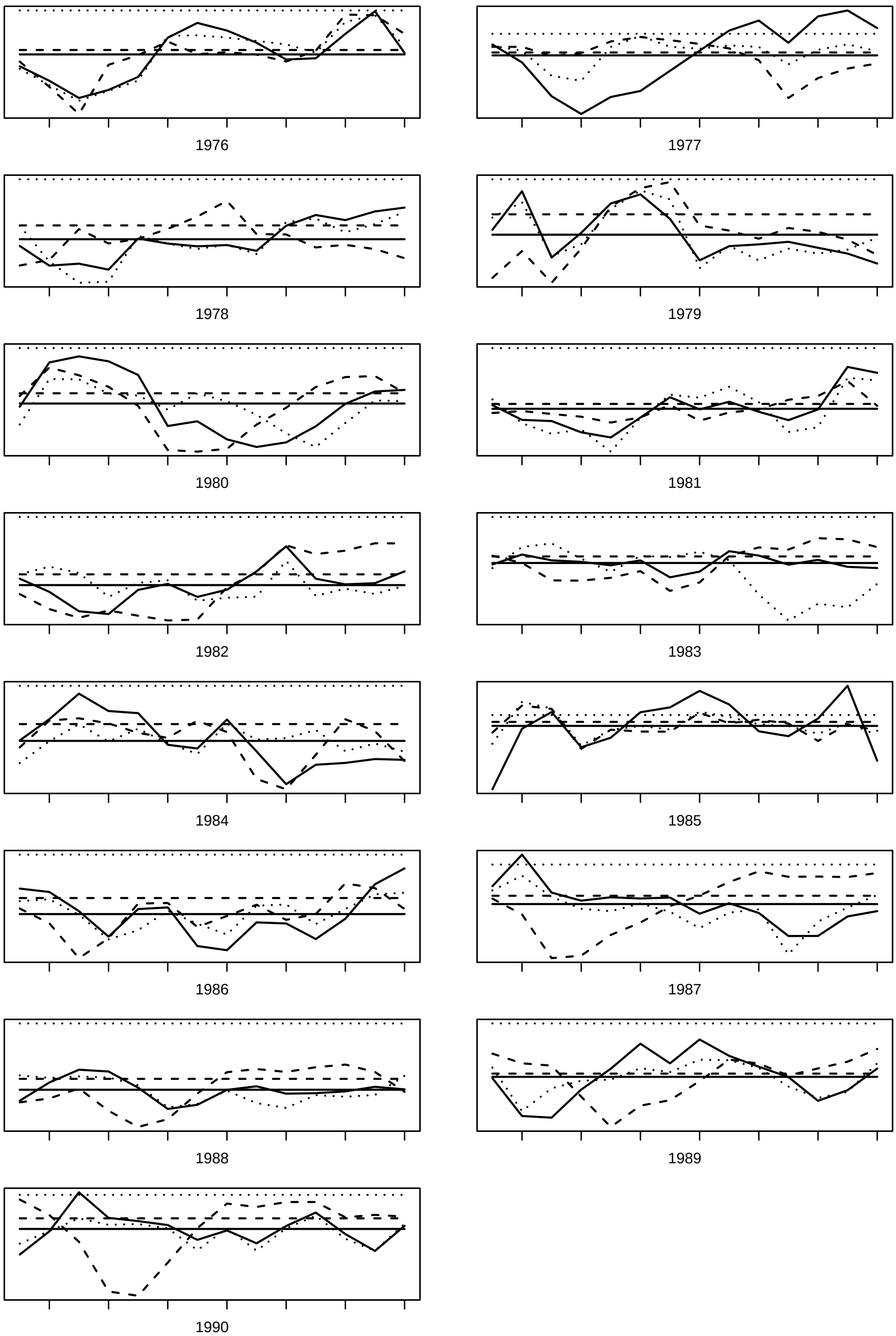
Grafik 11.13: $O_2$ Mainz, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$ .......



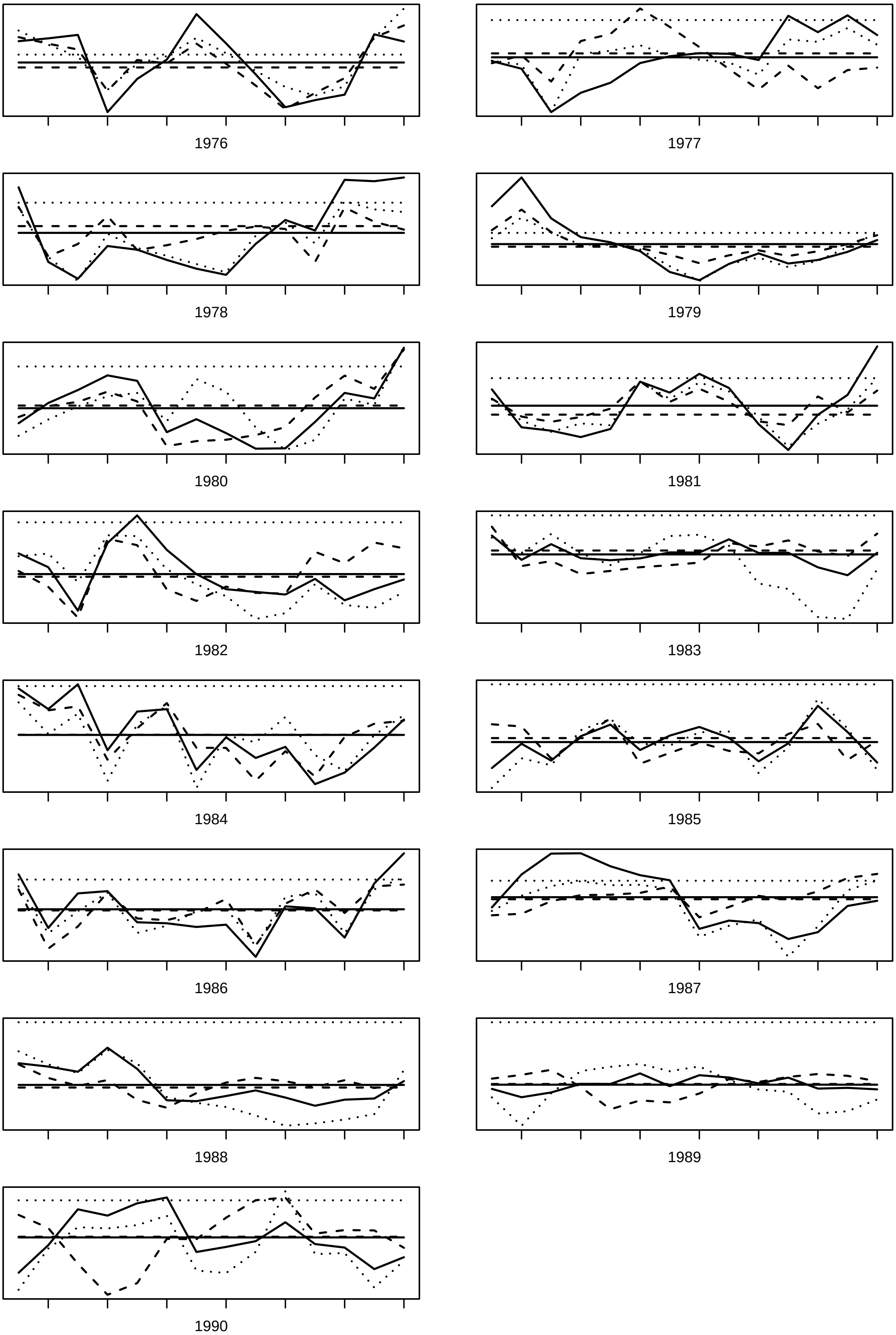
Grafik 11.14: CL Palzem, Mosel

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ …….. $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$…….



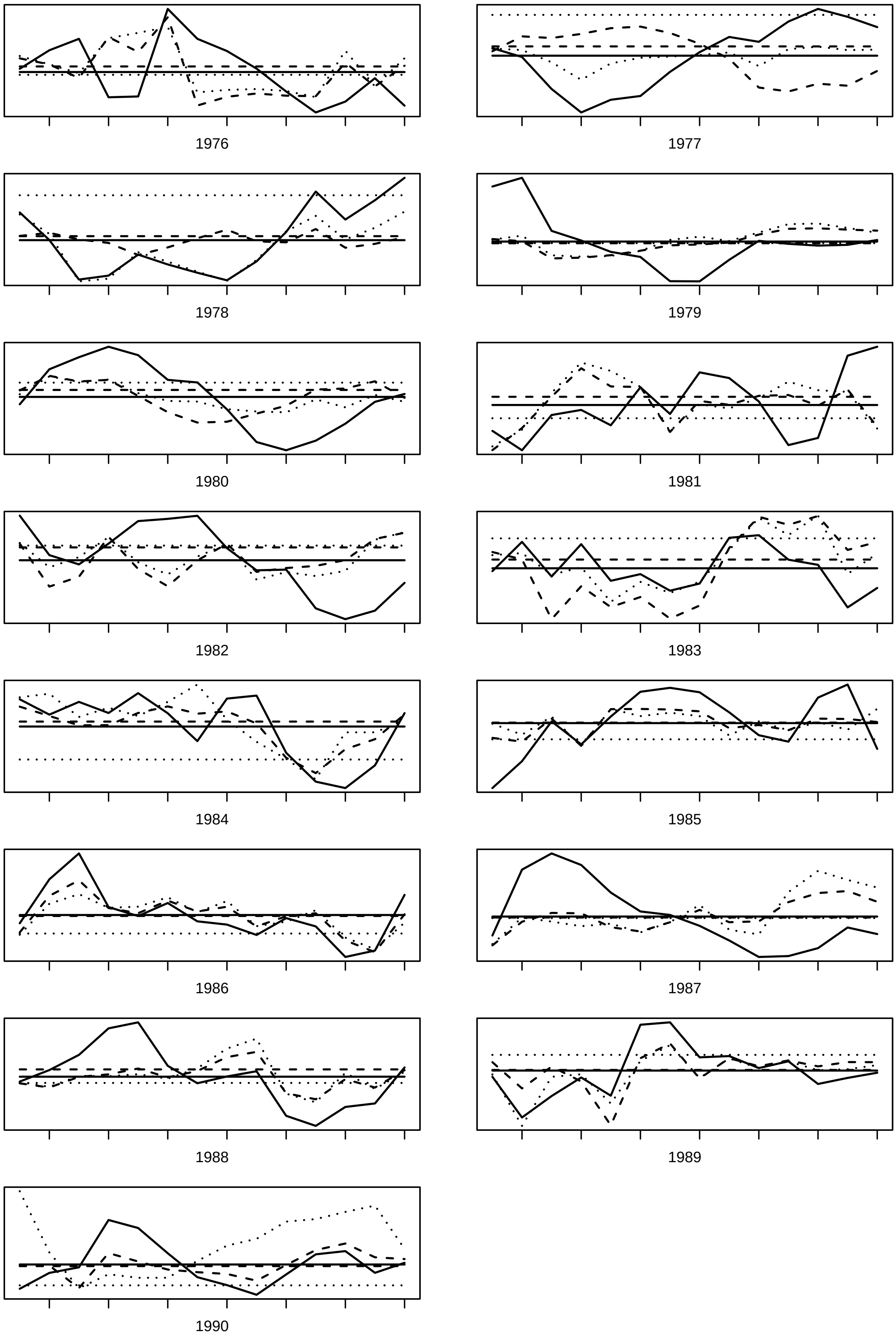
Grafik 11.15: P Palzem, Mosel

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$.......

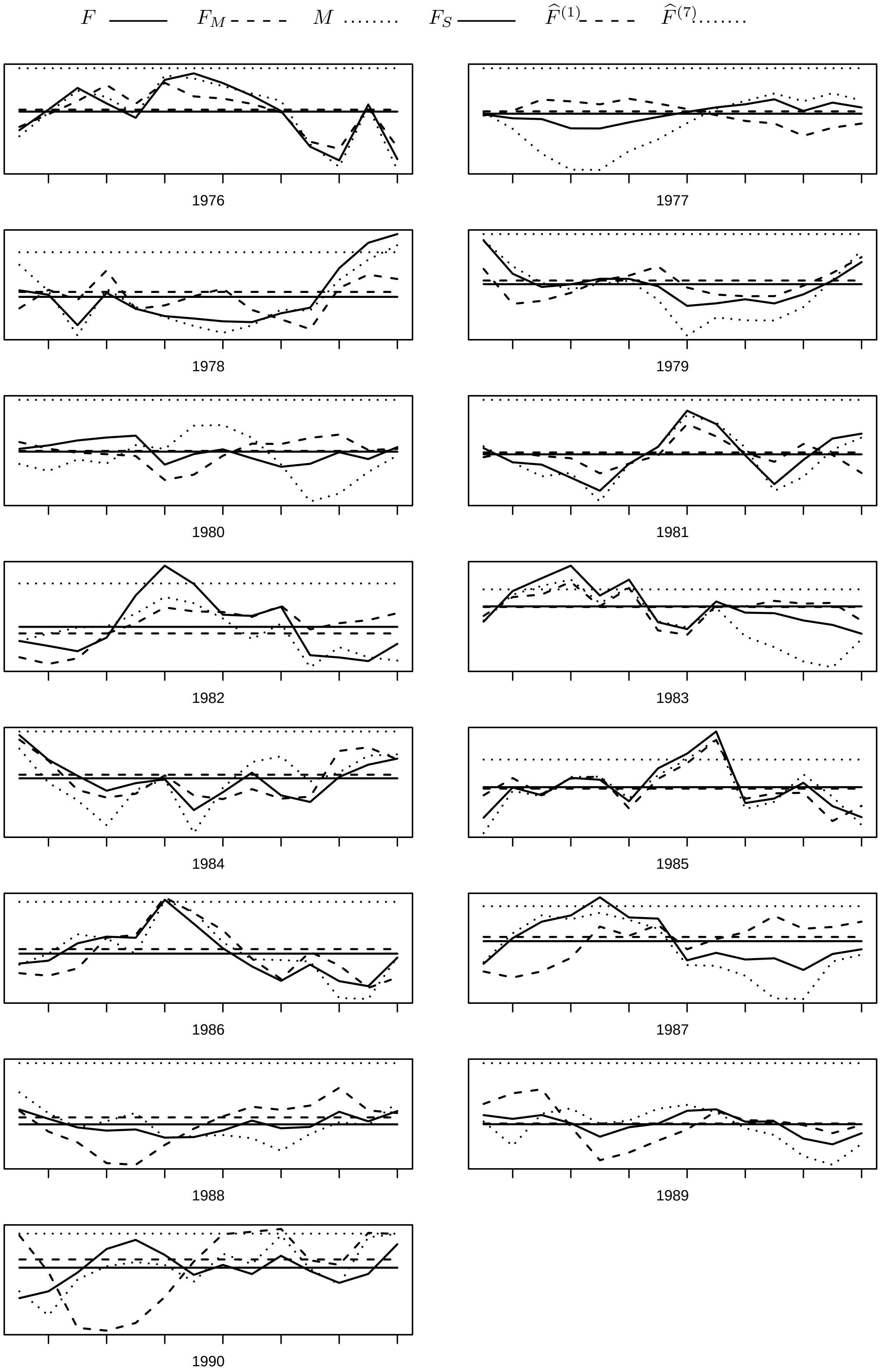


Grafik 11.16: $NO_3$ Palzem, Mosel

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$ .......

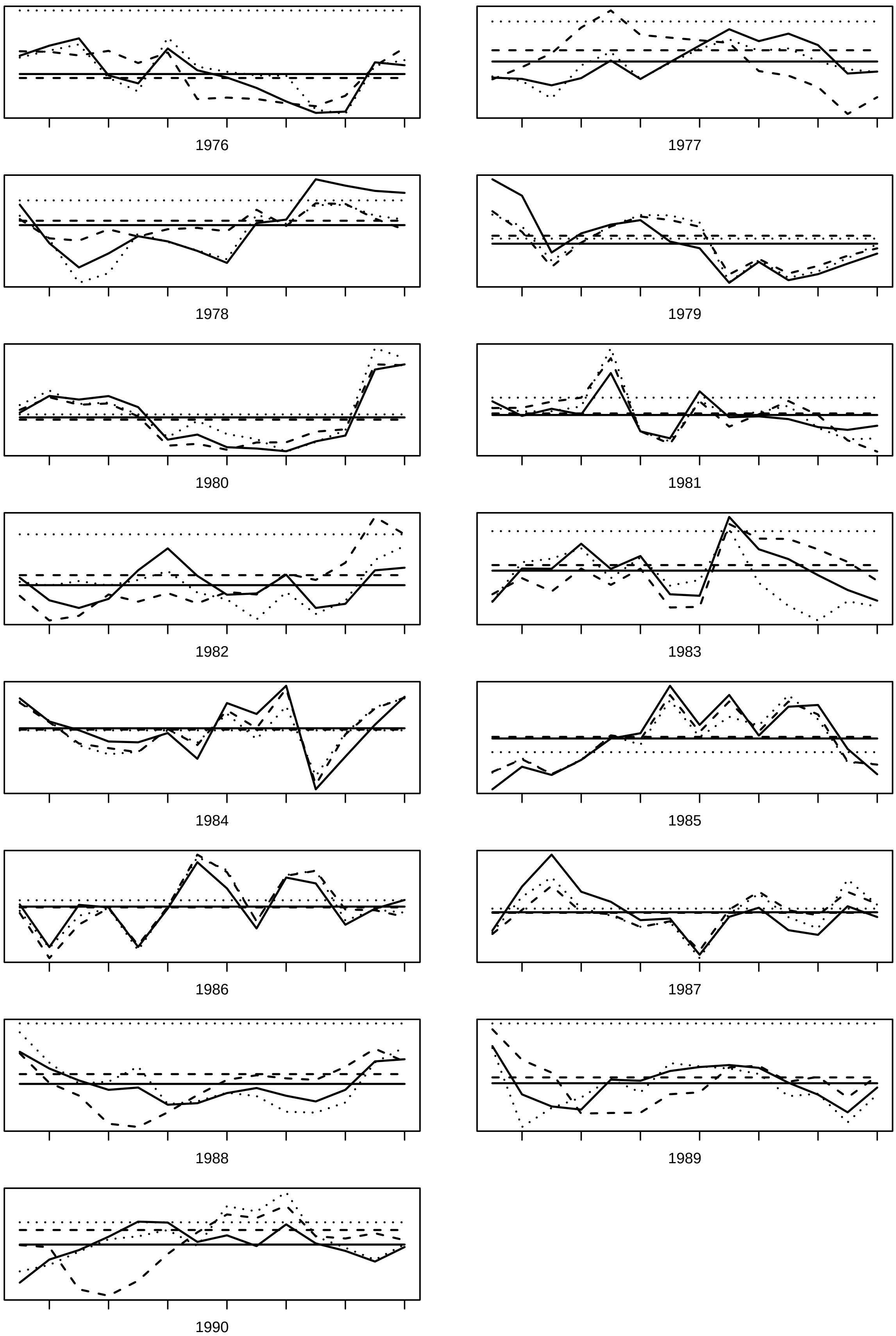


Grafik 11.17: $NO_2$ Palzem, Mosel



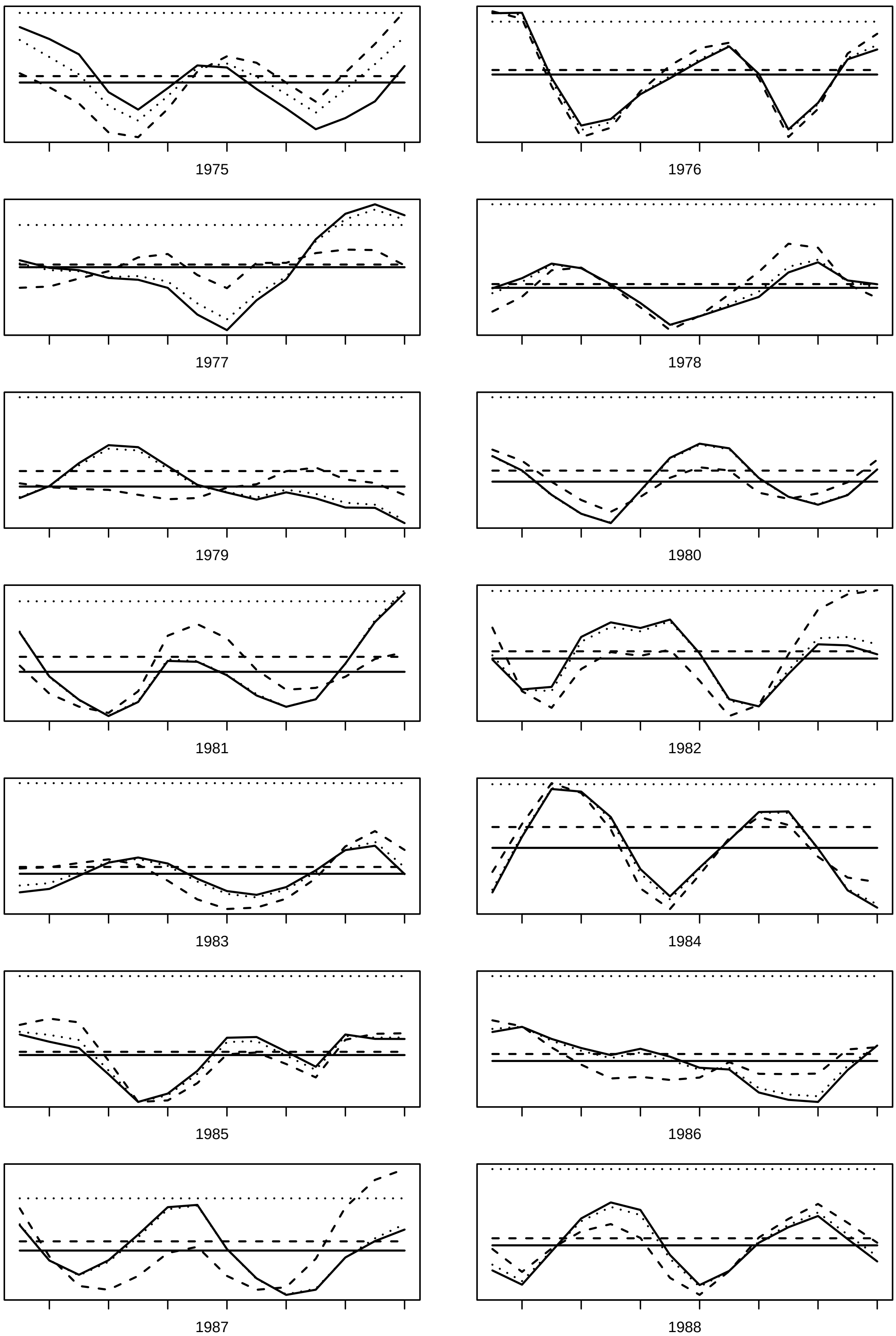
Grafik 11.18: $NH_4$ Palzem, Mosel

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(1)}$ - - - - $\widehat{F}^{(7)}$.......

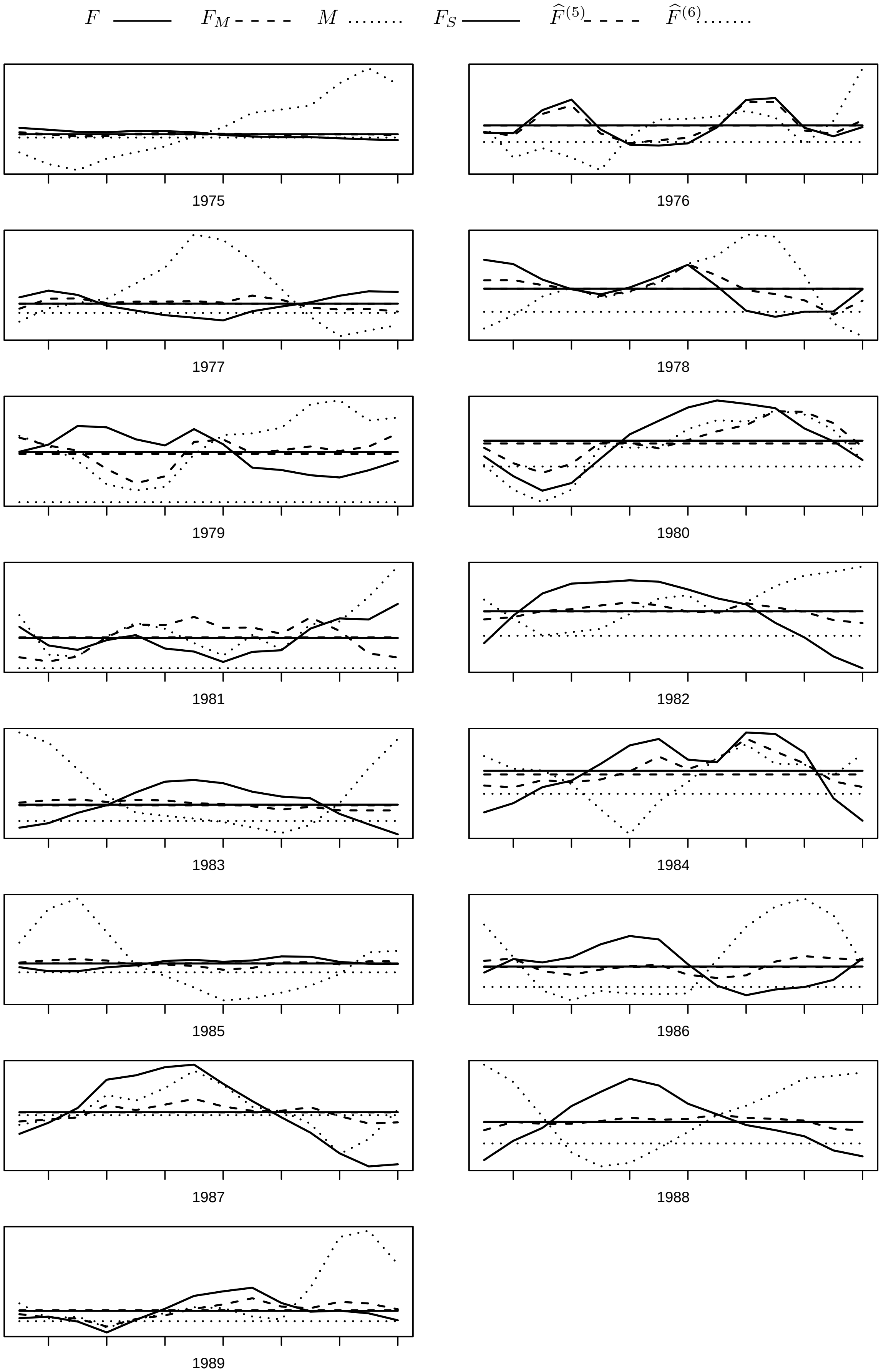


Grafik 12.01: CL Tagesmittelwerte Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - - $\widehat{F}^{(6)}$ .......

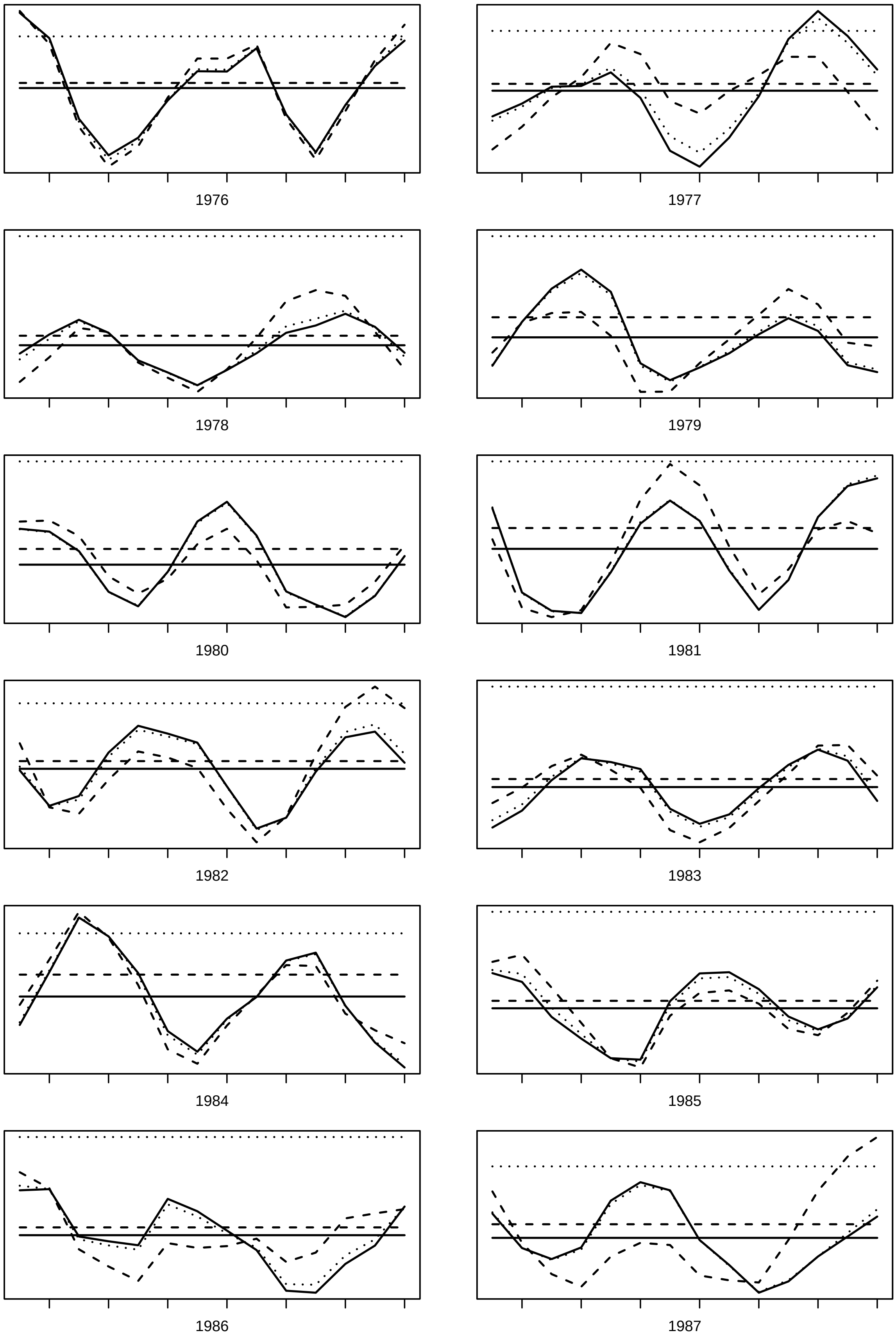


Grafik 12.02: $O_2$ Bimmen, Rhein



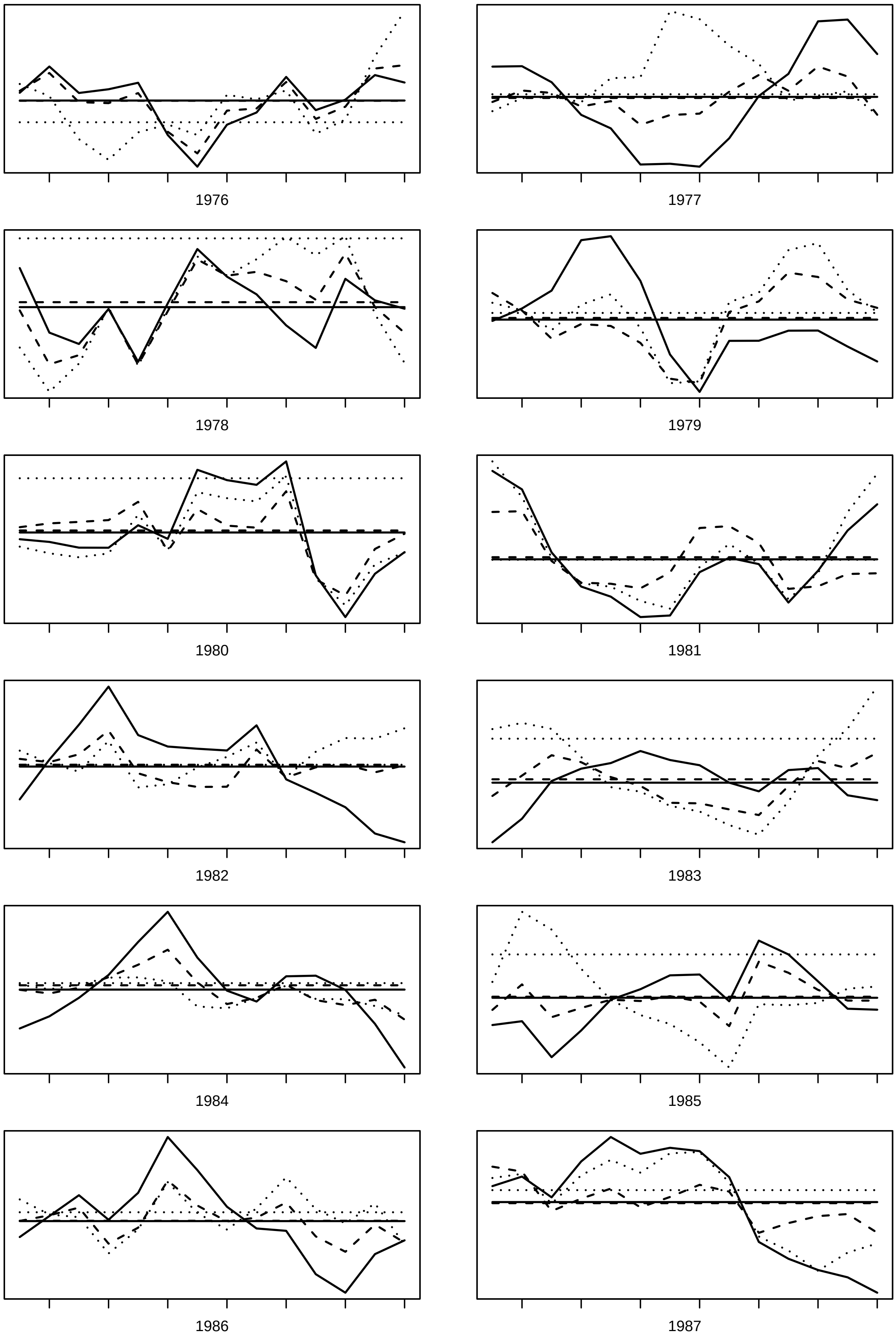
Grafik 12.03: CL Tagesmischproben Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - - $\widehat{F}^{(6)}$.......



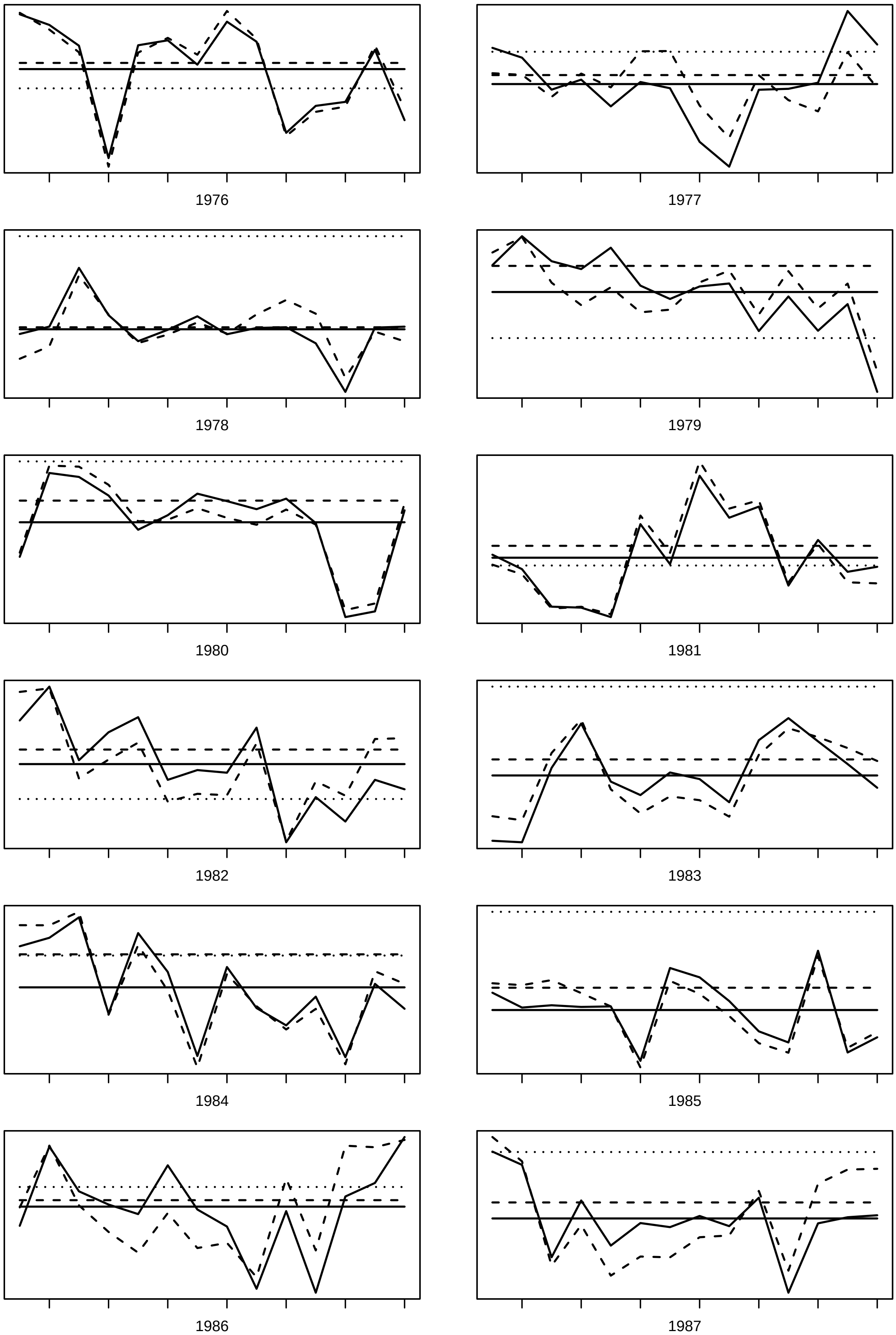
Grafik 12.04: $NO_3$ Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - - $\widehat{F}^{(6)}$ .......



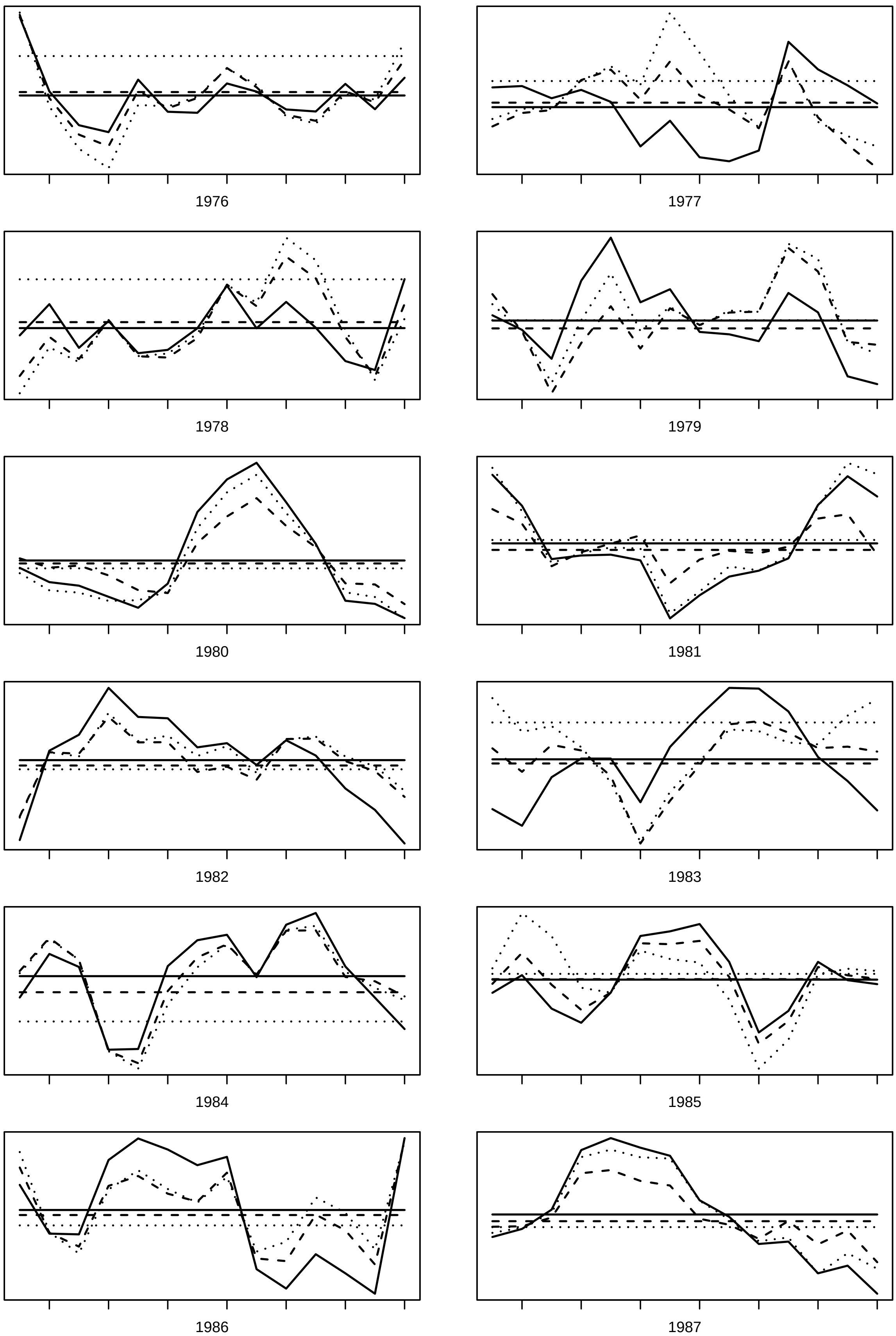
Grafik 12.05: $NH_4$ Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - -

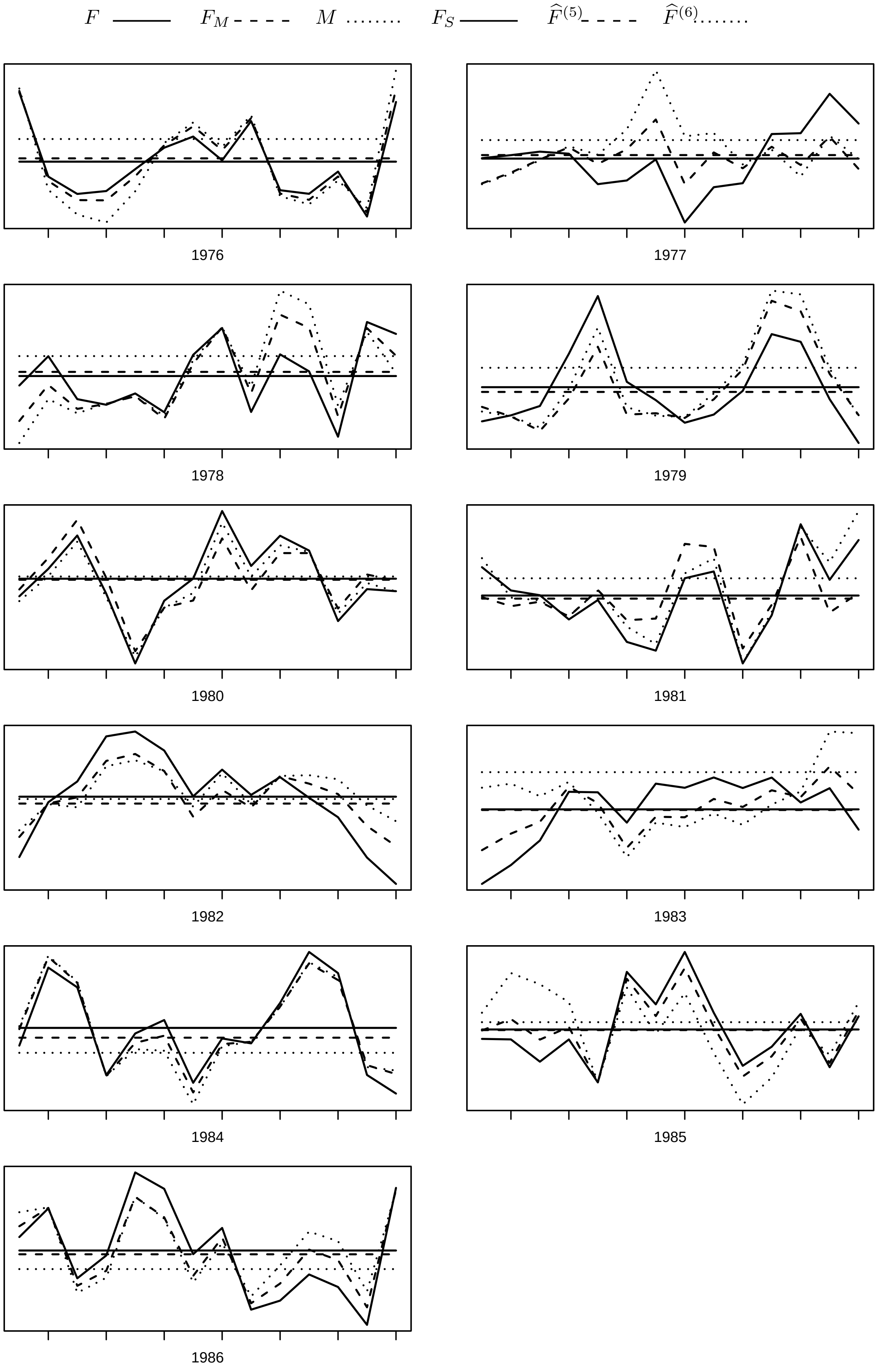


Grafik 12.06: $KMnO_4$ Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ …….. $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - - $\widehat{F}^{(6)}$ ……..

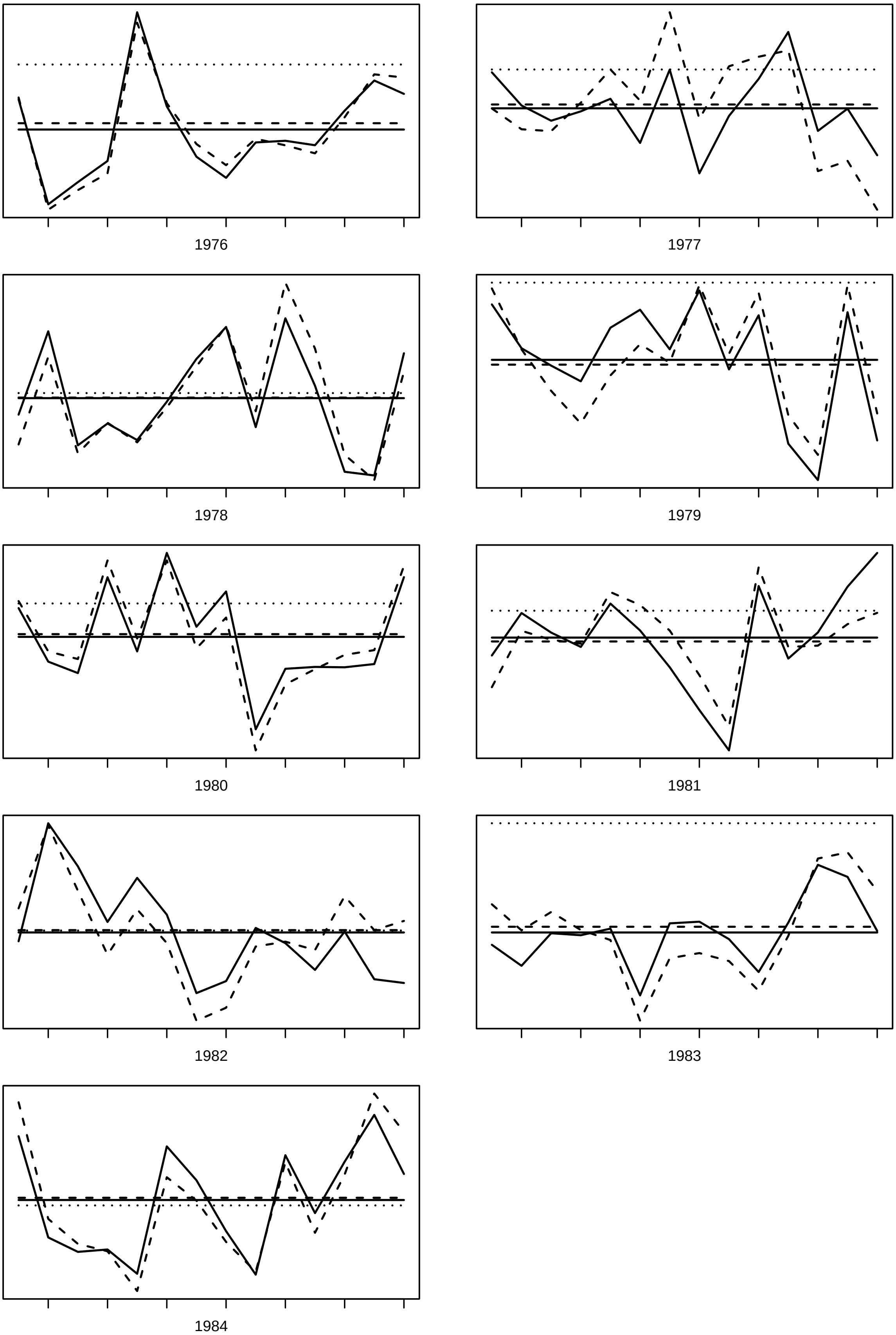


Grafik 12.07: CSB Bimmen, Rhein



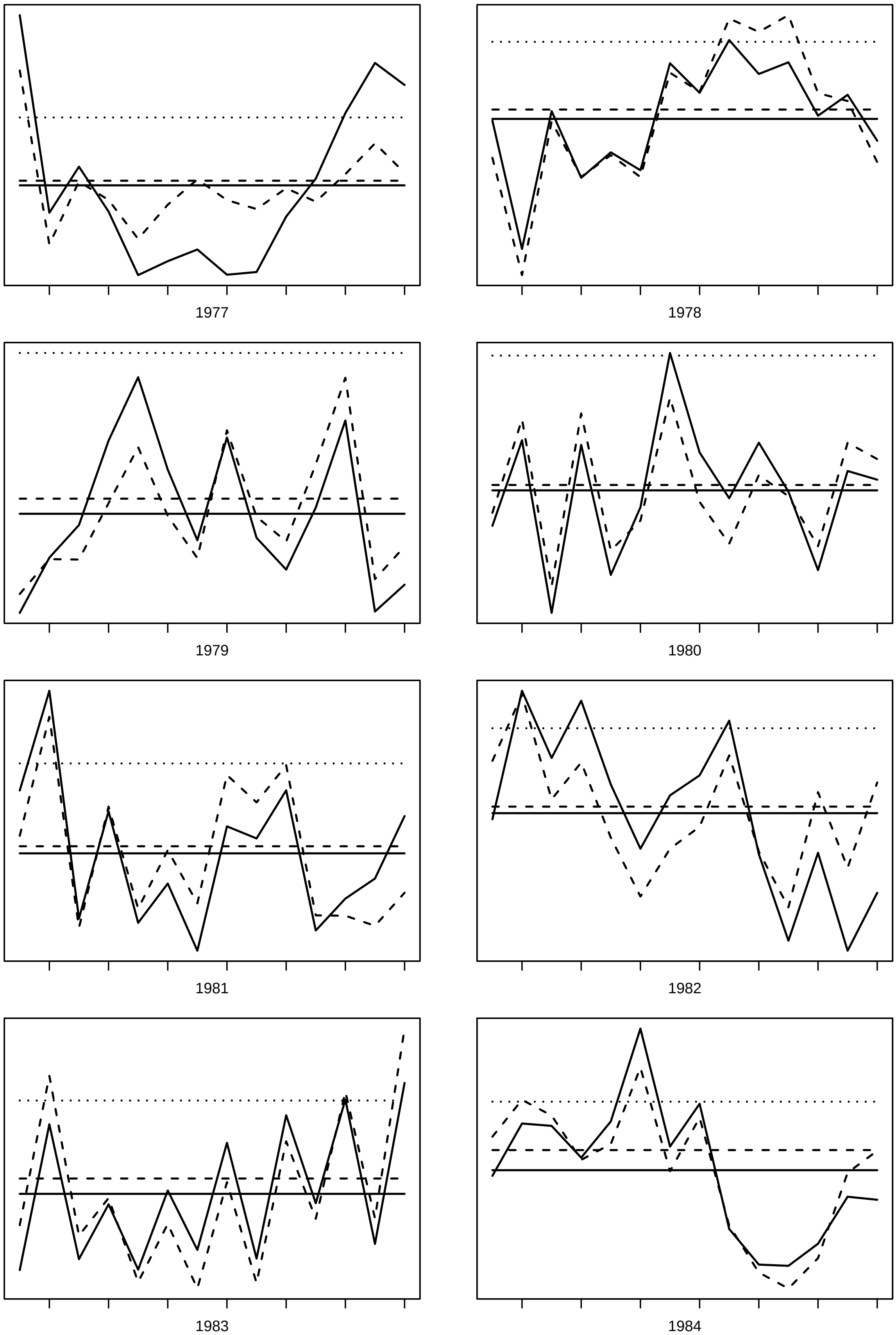
Grafik 12.08: BSB Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ …….. $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - -



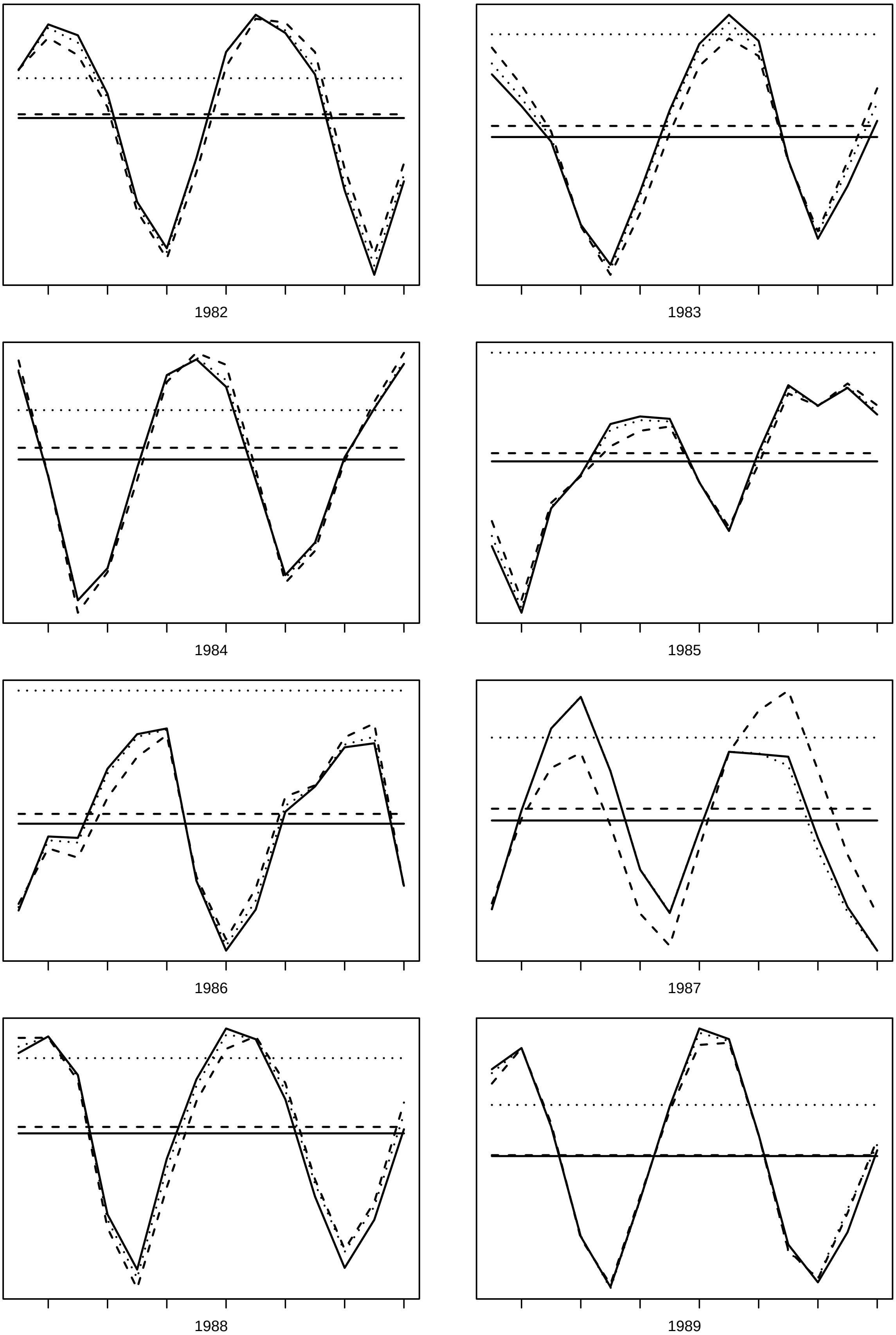
Grafik 12.09: $NO_2$ Bimmen, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - -



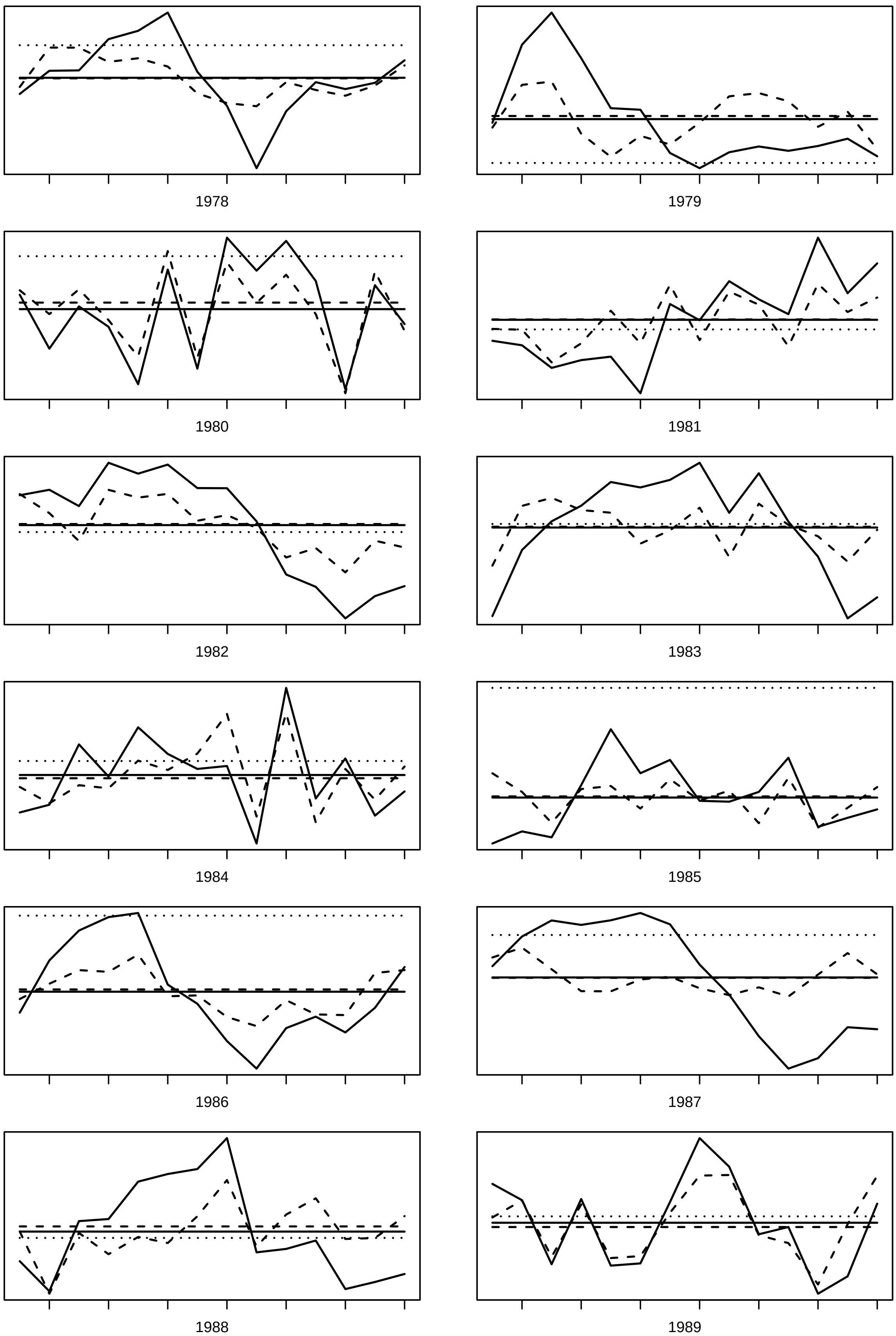
Grafik 12.10: CL Mainz, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - - $\widehat{F}^{(6)}$ .......



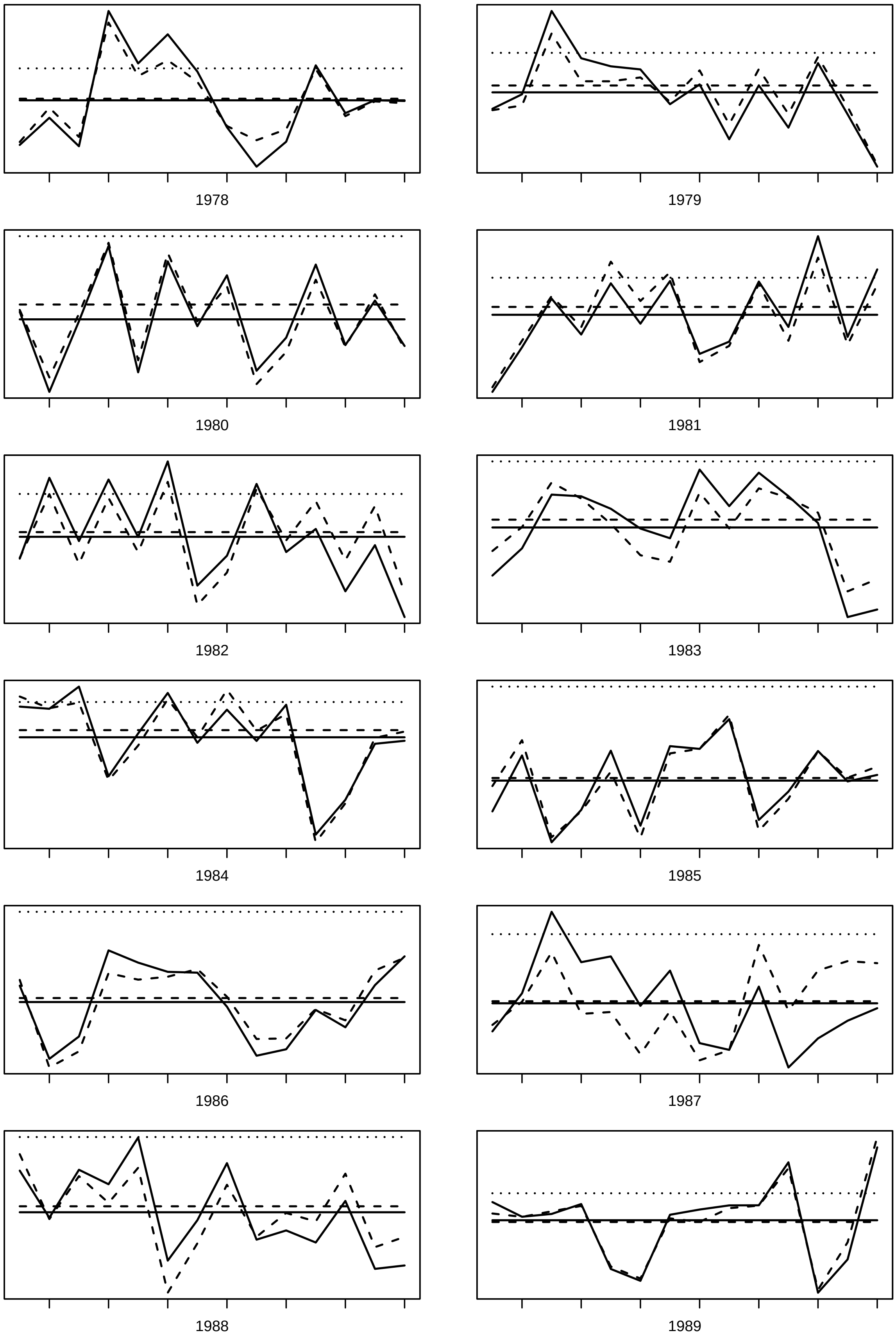
Grafik 12.11: $NO_x$ Mainz, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - -



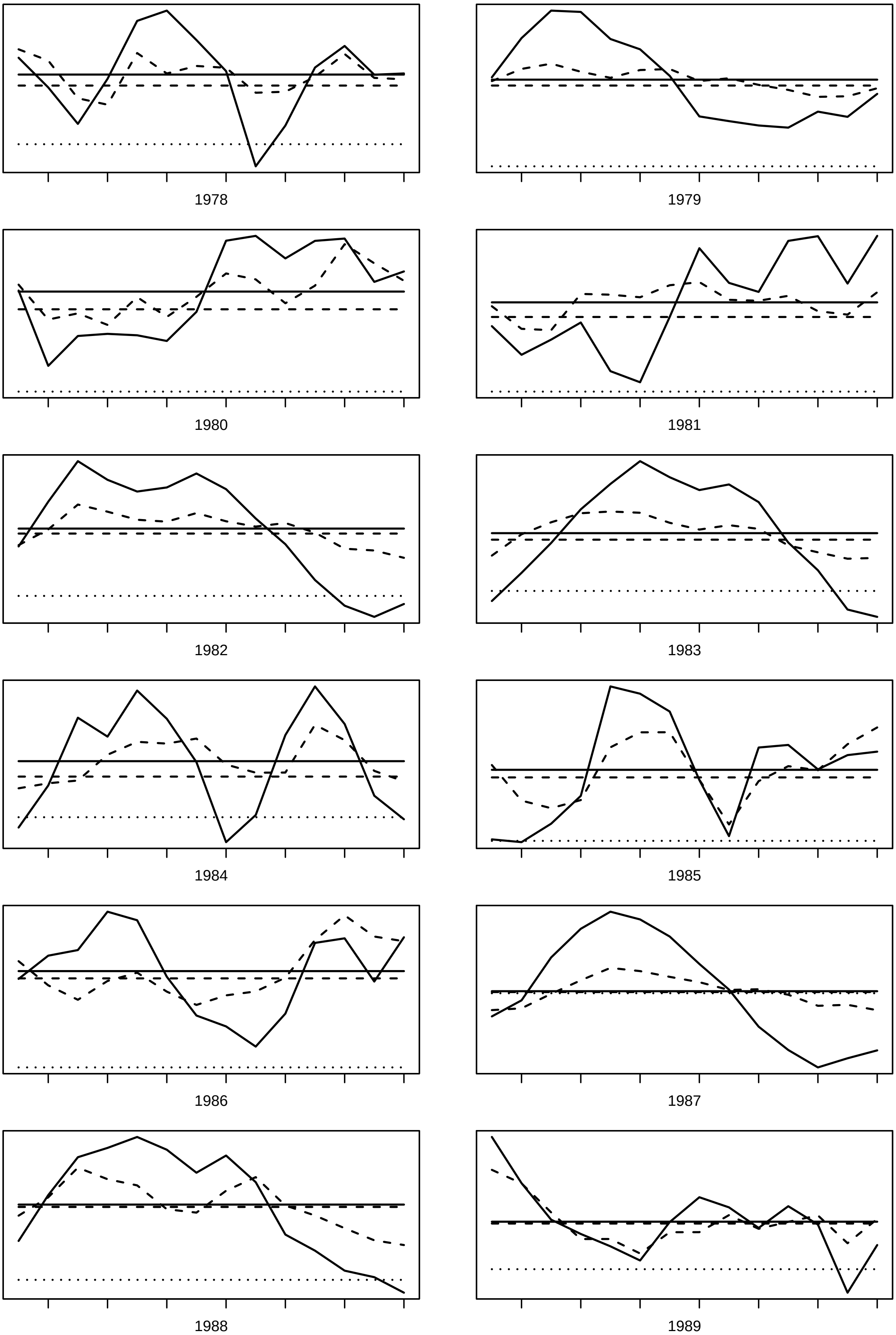
Grafik 12.12: $PO_4$ Mainz, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - -



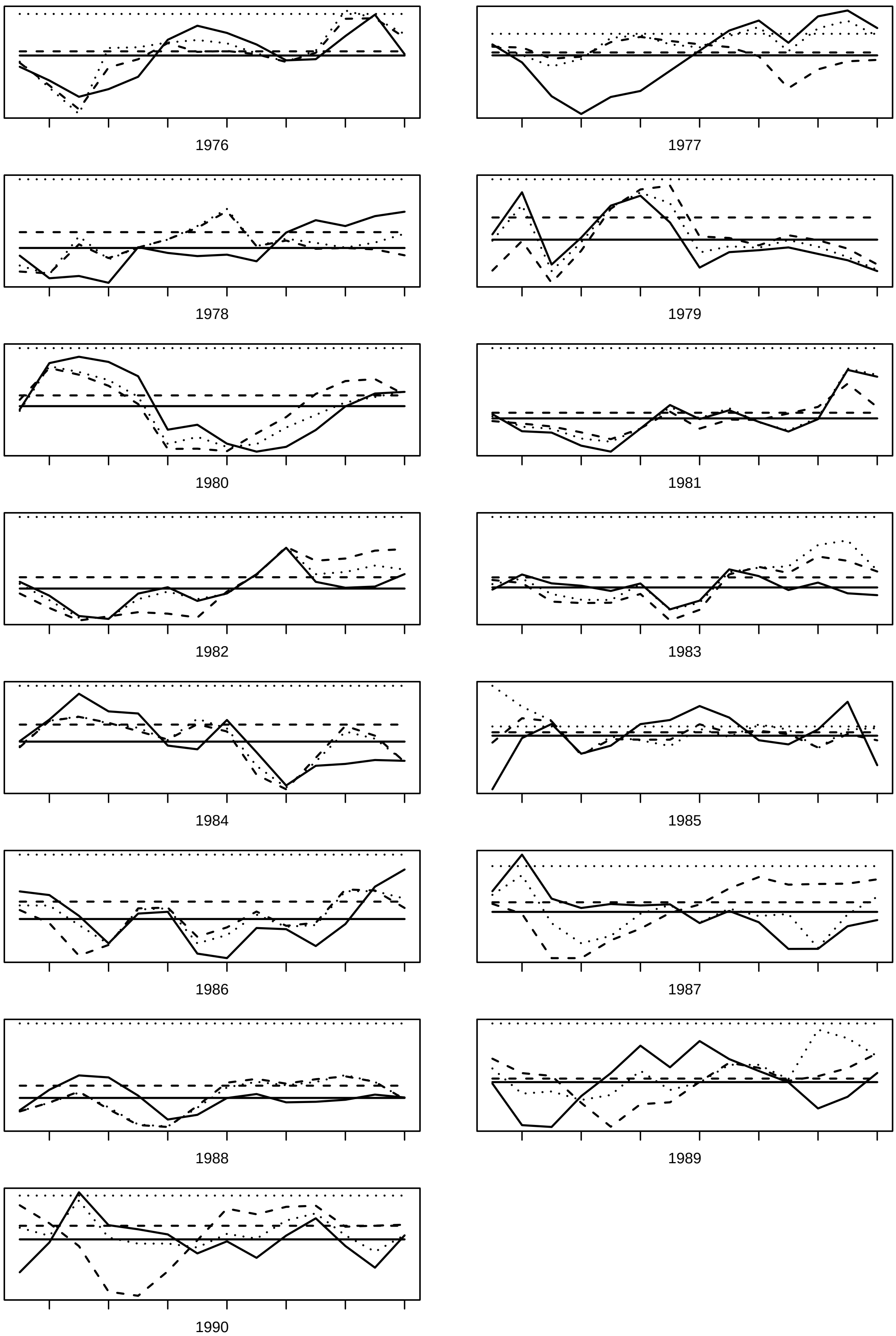
Grafik 12.13: $O_2$ Mainz, Rhein

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - -



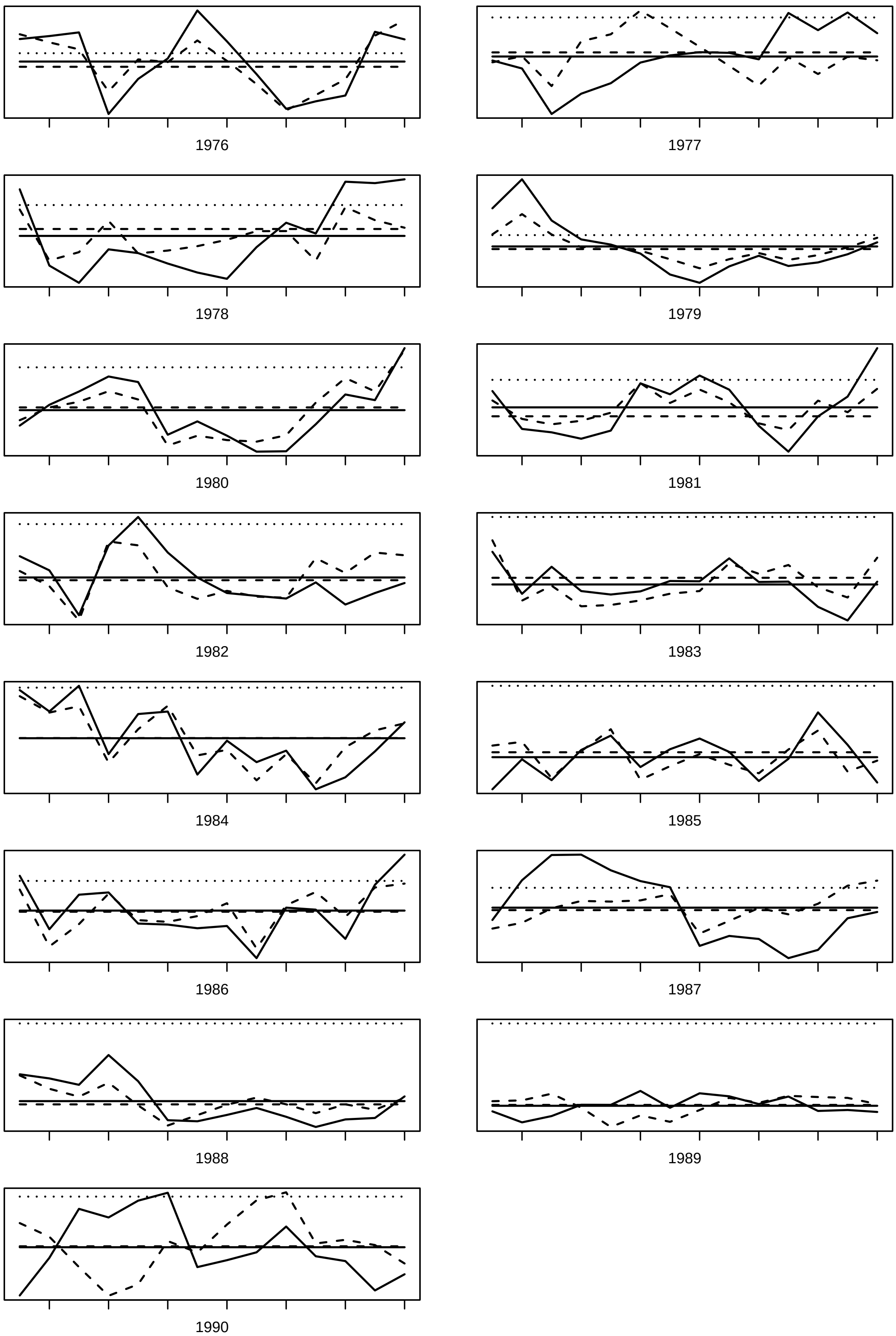
Grafik 12.14: CL Palzem, Mosel

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - - $\widehat{F}^{(6)}$ .......



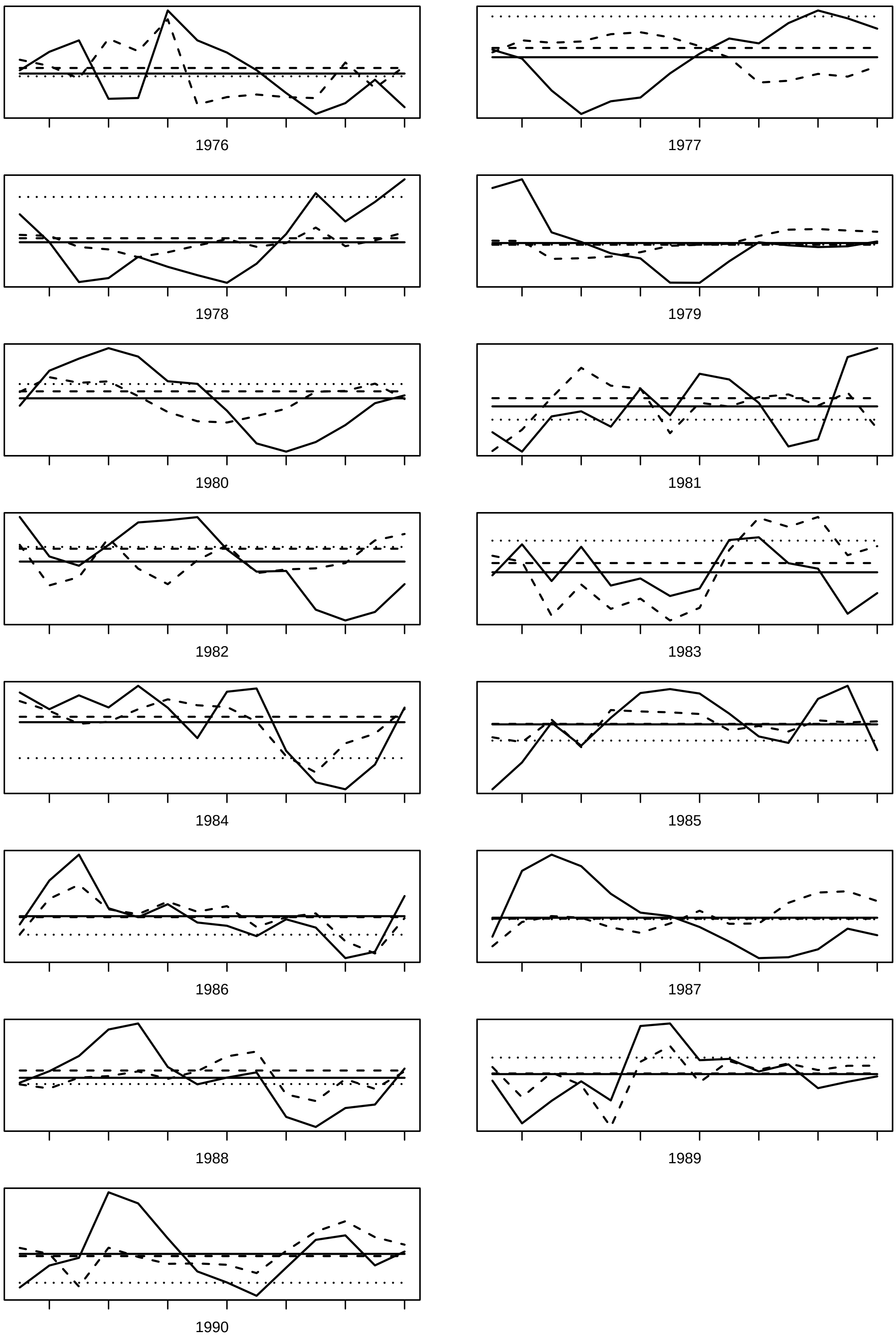
Grafik 12.15: P Palzem, Mosel

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - -



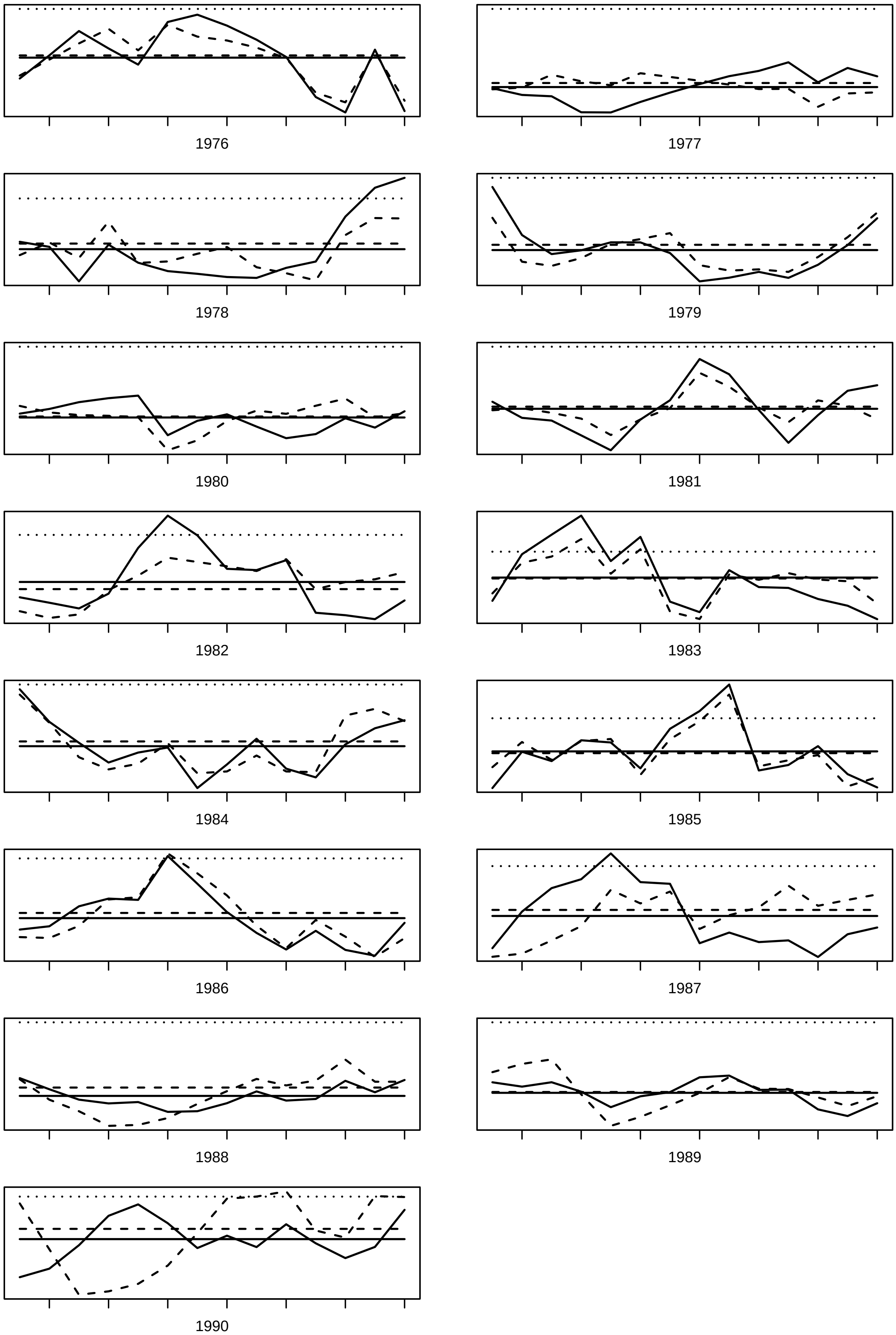
Grafik 12.16: $NO_3$ Palzem, Mosel

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - -



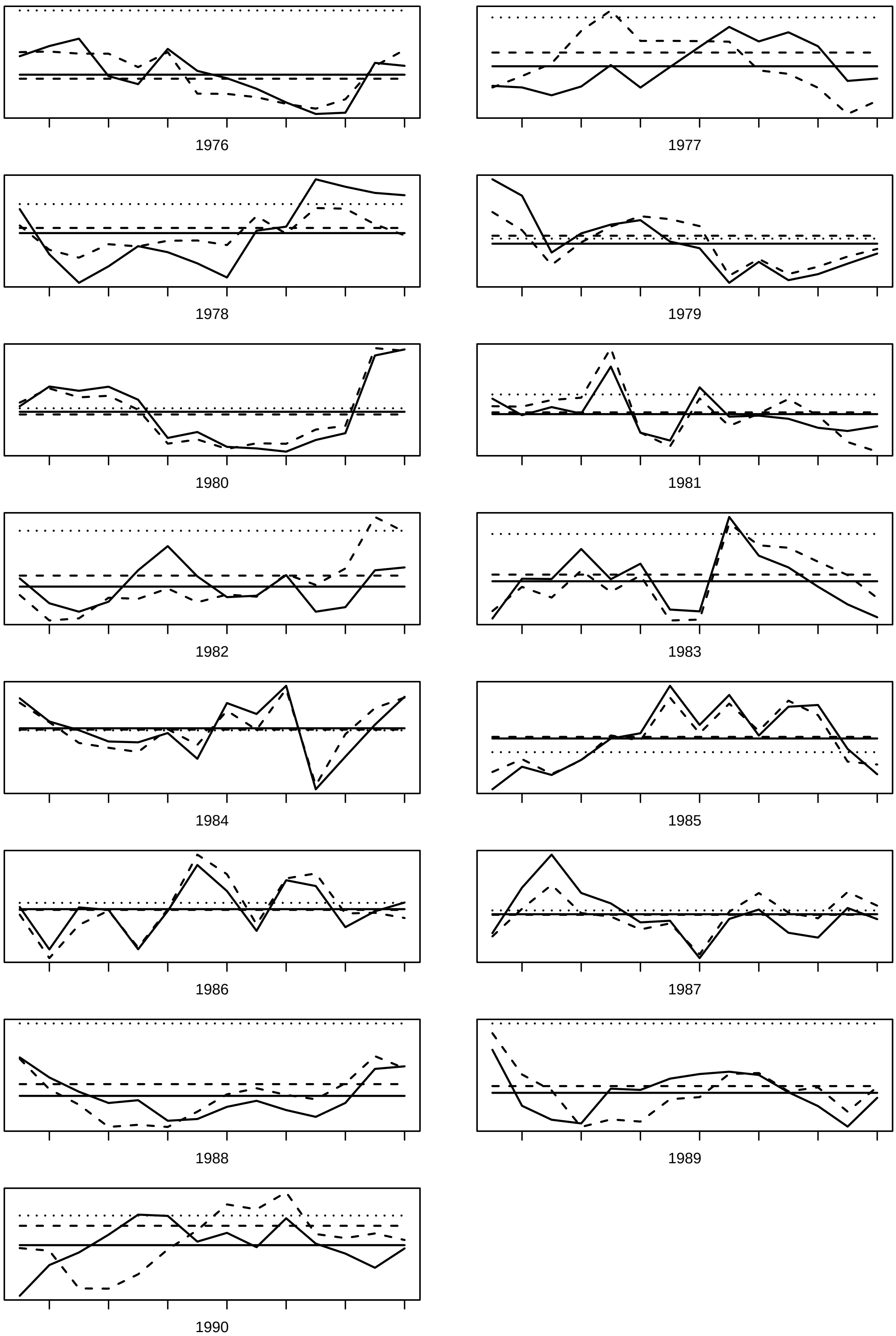
Grafik 12.17: $NO_2$ Palzem, Mosel

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - -



Grafik 12.18: $NH_4$ Palzem, Mosel

$F$ ——— $F_M$ - - - - $M$ ........ $F_S$ ——— $\widehat{F}^{(5)}$ - - - -



## A5 Theorie zum empirischen inhomogenen Transport-Modell

Zustand

$$\begin{aligned} T(t) &= \alpha + \boldsymbol{y}(t)'\boldsymbol{\beta} + V(t) \quad \text{mit} \quad \mu_V = 0 \;\Leftrightarrow\; \mu_T = \alpha + \boldsymbol{\mu}_y'\boldsymbol{\beta} \\ &= \mu_T + (\boldsymbol{y}(t) - \boldsymbol{\mu}_y)'\boldsymbol{\beta} + V(t)\,, \end{aligned}$$

Varianz $\sigma_V^2 = \sigma_T^2 + \boldsymbol{\beta}'\Sigma_{yy}\boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{\sigma}_{yT}'\boldsymbol{\beta} = \sigma_T^2 - \boldsymbol{\beta}'\Sigma_{yy}\boldsymbol{\beta}$ ist minimal, wenn $\Sigma_{yy}\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\sigma}_{yT}$.

Beobachtung $t = t_1, \ldots, t_n$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{T} &= \mathbf{1}\alpha + \boldsymbol{Y}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{v} \quad \text{mit} \quad \overline{V} = 0 \;\Leftrightarrow\; \overline{T} = \alpha + \overline{\boldsymbol{y}}'\boldsymbol{\beta} \\ &= \mathbf{1}\overline{T} + (\boldsymbol{Y} - \mathbf{1}\overline{\boldsymbol{y}}')\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{v}\,, \end{aligned}$$

Schätzung: $s_V^2 = s_T^2 + \boldsymbol{\beta}'S_{yy}\boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{s}_{yT}'\boldsymbol{\beta}$ ist minimal für $\widehat{\alpha} = \overline{T} - \overline{\boldsymbol{y}}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}$, $\widehat{\boldsymbol{\beta}} = S_{yy}^{-1}\boldsymbol{s}_{yT}$

$$\widehat{T}(t) := \widehat{\alpha} + \boldsymbol{y}(t)'\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \overline{T} + (\boldsymbol{y}(t) - \overline{\boldsymbol{y}})'\widehat{\boldsymbol{\beta}} \quad \text{mit} \quad \overline{\widehat{T}} = \overline{T}\,, \quad \widehat{V}(t) := T(t) - \widehat{T}(t)$$

$$\begin{aligned} \mu_{\widehat{T}} &= \widehat{\alpha} + \boldsymbol{\mu}_y'\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \overline{T} - (\overline{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{\mu}_y)'\widehat{\boldsymbol{\beta}} \\ \widehat{\boldsymbol{T}} &= \mathbf{1}\widehat{\alpha} + \boldsymbol{Y}\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{1}\overline{T} + (\boldsymbol{Y} - \mathbf{1}\overline{\boldsymbol{y}}')\widehat{\boldsymbol{\beta}}\,, \quad \widehat{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{T} - \widehat{\boldsymbol{T}}\,, \end{aligned}$$

Varianzen und Kovarianzen

$$s_{\widehat{V}\widehat{T}} = s_{T\widehat{T}} - s_{\widehat{T}}^2 = 0, \;\text{ da }\; s_{\widehat{T}}^2 = \widehat{\boldsymbol{\beta}}'S_{yy}\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{s}_{yT}'\widehat{\boldsymbol{\beta}} = s_{T\widehat{T}}, \;\; s_T^2 = s_{\widehat{T}}^2 + s_{\widehat{V}}^2, \;\; s_{\widehat{V}}^2 = s_{T\widehat{V}}.$$

Aufteilung

$$\boldsymbol{y}(t)' = \begin{pmatrix} \boldsymbol{y}_1(t)' & \boldsymbol{y}_2(t)' \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta}_1 \\ \boldsymbol{\beta}_2 \end{pmatrix}$$

$$S_{yy}\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{s}_{yT} \;\Leftrightarrow\; \begin{pmatrix} S_{y_1y_1} & S_{y_1y_2} \\ S_{y_2y_1} & S_{y_2y_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1 \\ \widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{s}_{y_1T} \\ \boldsymbol{s}_{y_2T} \end{pmatrix} \;\Leftrightarrow\; \begin{aligned} S_{y_1y_1}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1 + S_{y_1y_2}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 &= \boldsymbol{s}_{y_1T} \\ S_{y_2y_1}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1 + S_{y_2y_2}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 &= \boldsymbol{s}_{y_2T} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1 &= \overbrace{S_{y_1y_1}^{-1}\boldsymbol{s}_{y_1T}}^{\widehat{\beta}_1^{(1)} \text{ s.u.}} - \overbrace{S_{y_1y_1}^{-1}S_{y_1y_2}}^{\widehat{B}_1 \text{ s.u.}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 \\ \underbrace{(S_{y_2y_2} - S_{y_2y_1}S_{y_1y_1}^{-1}S_{y_1y_2})}_{S_{\widehat{v}_2\widehat{v}_2} \text{ s.u.}}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 &= \underbrace{\boldsymbol{s}_{y_2T} - S_{y_2y_1}S_{y_1y_1}^{-1}\boldsymbol{s}_{y_1T}}_{s_{\widehat{v}_2\widehat{V}^{(1)}} \text{ s.u.}} \end{aligned}$$

Varianzzerlegung

$$\begin{aligned} s_{\widehat{T}}^2 &= \boldsymbol{s}_{yT}'\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{s}_{y_1T}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1 + \boldsymbol{s}_{y_2T}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 = \underbrace{\boldsymbol{s}_{y_1T}'S_{y_1y_1}^{-1}\boldsymbol{s}_{y_1T}}_{s_{\widehat{T}^{(1)}}^2 \text{ s.u.}} + (\underbrace{\boldsymbol{s}_{y_2T} - S_{y_2y_1}S_{y_1y_1}^{-1}\boldsymbol{s}_{y_1T}}_{s_{\widehat{v}_2\widehat{V}_1} \text{ s.u.}})'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 \\ &= s_{\widehat{T}^{(1)}}^2 + s_{\widehat{\widehat{V}}_1}^2 \end{aligned}$$

$$s_{\widehat{V}}^2 = s_T^2 - s_{\widehat{T}}^2 = \underbrace{s_T^2 - s_{\widehat{T}_1}^2}_{s_{\widehat{V}_1}^2 \text{ s.u.}} - s_{\widehat{\widehat{V}}_1}^2 \le s_{\widehat{V}^{(1)}}^2, \;\text{ da }\; \boldsymbol{s}_{\widehat{v}_2\widehat{V}_1}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 = s_{\widehat{\widehat{V}}_1}^2 \;\text{ s.u.}$$

Teilmodell für $T$ bezüglich $\boldsymbol{y}_1$

$$\begin{aligned} T(t) &= \alpha + \boldsymbol{y}_1(t)'\boldsymbol{\beta}_1 + V_1(t) \quad \text{mit} \quad \mu_{V_1} = 0 \;\Leftrightarrow\; \mu_T = \alpha + \boldsymbol{\mu}_{y_1}'\boldsymbol{\beta}_1 \\ &= \mu_T + (\boldsymbol{y}_1(t) - \boldsymbol{\mu}_{y_1})'\boldsymbol{\beta}_1 + V_1(t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{T} &= \mathbf{1}\alpha + \boldsymbol{Y}_1\boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{v}_1 \quad \text{mit} \quad \overline{V_1} = 0 \;\Leftrightarrow\; \overline{T} = \alpha + \overline{\boldsymbol{y}}_1'\boldsymbol{\beta}_1 \\ &= \mathbf{1}\overline{T} + (\boldsymbol{Y}_1 - \mathbf{1}\overline{\boldsymbol{y}}_1')\boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{v}_1 \quad \text{und} \quad \widehat{\alpha}^{(1)} = \overline{T} - \overline{\boldsymbol{y}}_1'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)}, \quad \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)} = S_{y_1y_1}^{-1}\boldsymbol{s}_{y_1T} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\widehat{T}^{(1)}(t) := \widehat{\alpha}^{(1)} + \boldsymbol{y}_1(t)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)} = \overline{T} + (\boldsymbol{y}_1(t) - \overline{\boldsymbol{y}}_1)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)}, \;\; \overline{\widehat{T}}^{(1)} = \overline{T}, \;\; \widehat{V}_1(t) := T(t) - \widehat{T}^{(1)}(t) \\
&\mu_{\widehat{T}^{(1)}} \;=\; \widehat{\alpha}^{(1)} + \boldsymbol{\mu}_{y_1}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)} = \overline{T} - (\overline{\boldsymbol{y}}_1 - \boldsymbol{\mu}_{y_1})'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)} \\
&\widehat{\boldsymbol{T}}^{(1)} \;=\; \boldsymbol{1}\widehat{\alpha}^{(1)} + \boldsymbol{Y}_1\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)} = \boldsymbol{1}\overline{T} + (\boldsymbol{Y}_1 - \boldsymbol{1}\overline{\boldsymbol{y}}_1')\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)}, \quad \widehat{\boldsymbol{v}}_1 = \boldsymbol{T} - \widehat{\boldsymbol{T}}^{(1)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&s_{\widehat{V}_1\widehat{T}(1)} = s_{T\widehat{T}^{(1)}} - s^2_{\widehat{T}^{(1)}} = 0\,, \;\text{ da }\; s^2_{\widehat{T}^{(1)}} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)\prime} S_{y_1y_1}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)} = \boldsymbol{s}_{y_1T}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)} = s_{T\widehat{T}^{(1)}}, \\
&\quad s_T^2 = s^2_{\widehat{T}^{(1)}} + s^2_{\widehat{V}_1}, \;\; s^2_{\widehat{V}_1} = s_{T\widehat{V}_1}
\end{aligned}
$$

Untermodell für $\boldsymbol{y}_2$ bezüglich $\boldsymbol{y}_1$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{y}_2(t)' &= \alpha' + \boldsymbol{y}_1(t)'B_1 + \boldsymbol{v}_2(t)' \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\mu}_{v_2}' = 0 \;\Leftrightarrow\; \boldsymbol{\mu}_{y_2}' = \alpha' + \boldsymbol{\mu}_{y_1}'B_1 \\
&= \boldsymbol{\mu}_{y_2}' + (\boldsymbol{y}_1(t) - \boldsymbol{\mu}_{y_1})'B_1 + \boldsymbol{v}_2(t)' \\
\boldsymbol{Y}_2 &= \boldsymbol{1}\alpha' + \boldsymbol{Y}_1B_1 + \boldsymbol{V}_2 \quad \text{mit} \quad \overline{\boldsymbol{v}}_2' = 0 \;\Leftrightarrow\; \overline{\boldsymbol{y}}_2' = \alpha' + \overline{\boldsymbol{y}}_1'B_1 \\
&= \boldsymbol{1}\overline{\boldsymbol{y}}_2' + (\boldsymbol{Y}_1 - \boldsymbol{1}\overline{\boldsymbol{y}}_1')B_1 + \boldsymbol{V}_2 \quad \text{und} \quad \widehat{\alpha}' = \overline{\boldsymbol{y}}_2' - \overline{\boldsymbol{y}}_1'\widehat{B}_1\,, \quad \widehat{B}_1 = S_{y_1y_1}^{-1}S_{y_1y_2} \\
\widehat{\boldsymbol{y}}_2(t)' &:= \widehat{\alpha}' + \boldsymbol{y}_1(t)'\widehat{B}_1 = \overline{\boldsymbol{y}}_2' + (\boldsymbol{y}_1(t) - \overline{\boldsymbol{y}}_1)'\widehat{B}_1, \;\; \overline{\widehat{\boldsymbol{y}}}_2' = \overline{\boldsymbol{y}}_2', \;\; \widehat{\boldsymbol{v}}_2(t)' := \boldsymbol{y}_2(t)' - \widehat{\boldsymbol{y}}_2(t)' \\
\boldsymbol{\mu}_{\widehat{y}_2}' &= \widehat{\alpha}' + \boldsymbol{\mu}_{y_1}'\widehat{B}_1 = \overline{\boldsymbol{y}}_2' - (\overline{\boldsymbol{y}}_1 - \boldsymbol{\mu}_{y_1})'\widehat{B}_1 \\
\widehat{\boldsymbol{Y}}_2 &= \boldsymbol{1}\widehat{\alpha}' + \boldsymbol{Y}_1\widehat{B}_1 = \boldsymbol{1}\overline{\boldsymbol{y}}_2' + (\boldsymbol{Y}_1 - \boldsymbol{1}\overline{\boldsymbol{y}}_1')\widehat{B}_1\,, \quad \widehat{\boldsymbol{V}}_2 = \boldsymbol{Y}_2 - \widehat{\boldsymbol{Y}}_2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&S_{\widehat{v}_2\widehat{y}_2} = S_{y_2\widehat{y}_2} - S_{\widehat{y}_2\widehat{y}_2} = 0\,, \;\text{ da }\; S_{\widehat{y}_2\widehat{y}_2} = \widehat{B}_1'S_{y_1y_1}\widehat{B}_1 = S_{y_2y_1}\widehat{B}_1 = S_{y_2\widehat{y}_2} = S_{\widehat{y}_2y_2} \\
&S_{y_2y_2} = S_{\widehat{y}_2\widehat{y}_2} + S_{\widehat{v}_2\widehat{v}_2}, \;\; S_{\widehat{v}_2\widehat{v}_2} = S_{y_2\widehat{v}_2}.
\end{aligned}
$$

Modell der Reste aus Teil- und Untermodell

$$
\begin{aligned}
\widehat{V}_1(t) &= \widehat{\boldsymbol{v}}_2(t)'\boldsymbol{\beta}_2 + V_{12}(t) \quad \text{mit} \quad \mu_{V_{12}} = 0 \;\Leftrightarrow\; \mu_{\widehat{V}_1} = \boldsymbol{\mu}_{\widehat{v}_2}'\boldsymbol{\beta}_2 (= 0 \text{ erfüllt, s.o.}) \\
\widehat{\boldsymbol{v}}_1 &= \widehat{\boldsymbol{V}}_2\boldsymbol{\beta}_2 + \boldsymbol{v}_{12} \quad \text{mit} \quad \overline{V}_{12} = 0 \;\Leftrightarrow\; \overline{\widehat{V}}_1 = \overline{\boldsymbol{v}}_2'\boldsymbol{\beta}_2 (= 0 \text{ erfüllt, s.o.})
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2^{(2)} &= S_{\widehat{v}_2\widehat{v}_2}^{-1}\boldsymbol{s}_{\widehat{v}_2\widehat{V}_1} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_2\,, \;\text{ da} \\
S_{\widehat{v}_2\widehat{v}_2} &= S_{y_2y_2} - \widehat{B}_1'S_{y_1y_1}\widehat{B}_1 = S_{y_2y_2} - S_{y_2y_1}S_{y_1y_1}^{-1}S_{y_1y_2} \\
\boldsymbol{s}_{\widehat{v}_2\widehat{V}_1} &= \boldsymbol{s}_{y_2T} + \underbrace{\boldsymbol{s}_{\widehat{y}_2\widehat{T}^{(1)}}}_{\widehat{B}_1'S_{y_1y_1}\widehat{\beta}_1^{(1)} = \widehat{B}_1'\boldsymbol{s}_{y_1T}} - \underbrace{\boldsymbol{s}_{\widehat{y}_2T}} - \underbrace{\boldsymbol{s}_{y_2\widehat{T}^{(1)}}}_{S_{y_2y_1}\widehat{\beta}_1^{(1)}} = \boldsymbol{s}_{y_2T} - S_{y_2y_1}S_{y_1y_1}^{-1}\boldsymbol{s}_{y_1T}
\end{aligned}
$$

$$
\widehat{\widehat{V}}_1(t) := \widehat{\boldsymbol{v}}_2(t)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 = \widehat{T}(t) - \widehat{T}^{(1)}(t)\,, \quad \widehat{\widehat{\boldsymbol{v}}}_1 = \widehat{\boldsymbol{V}}_2\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 = \widehat{\boldsymbol{T}} - \widehat{\boldsymbol{T}}^{(1)},
$$

da

$$
\begin{aligned}
\widehat{T}(t) &= \overline{T} + (\boldsymbol{y}(t) - \overline{\boldsymbol{y}})'\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \overline{T} + (\boldsymbol{y}_1(t) - \overline{\boldsymbol{y}}_1)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1 + (\boldsymbol{y}_2(t) - \overline{\boldsymbol{y}}_2)'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2, \;\; \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1 = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)} - \widehat{B}_1\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 \\
&= \widehat{T}^{(1)}(t) + \big((\boldsymbol{y}_2(t) - \overline{\boldsymbol{y}}_2)' - \underbrace{(\boldsymbol{y}_1(t) - \overline{\boldsymbol{y}}_1)'\widehat{B}_1}_{(\widehat{y}_2(t) - \overline{y}_2)'}\big)\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 = \widehat{T}^{(1)}(t) + \underbrace{(\boldsymbol{y}_2(t) - \widehat{\boldsymbol{y}}_2(t))}_{\widehat{v}_2(t)}{}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 \\
&= \widehat{T}^{(1)}(t) + \widehat{\widehat{V}}_1(t)
\end{aligned}
$$

und es gilt

$$
s^2_{\widehat{\widehat{V}}_1} = s_{\widehat{V}_1\widehat{\widehat{V}}_1} = s_{T\widehat{\widehat{V}}_1} - s_{\widehat{T}^{(1)}\widehat{\widehat{V}}_1} = s_{T\widehat{\widehat{V}}_1},
$$

da $s_{\widehat{T}^{(1)}\widehat{\widehat{V}}_1} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(1)\prime}S_{y_1\widehat{v}_2}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 = 0$ wegen $S_{y_1\widehat{v}_2} = S_{y_1y_2} - S_{y_1\widehat{y}_2} = S_{y_1y_2} - S_{y_1y_1}\widehat{B}_1 = 0.$

## A6 Beste lineare unverzerrte Prognosen

Im linearen Prognosemodell

$$\begin{aligned} y &= X\beta + u \\ y_0 &= X_0\beta + u_0 \end{aligned} \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} \mathsf{E}(u) = 0, \quad \mathsf{E}(uu') &= \Sigma_{yy} = \sigma^2 V, \\ \mathsf{E}(u_0) = 0, \quad \mathsf{E}(u_0u_0') &= \Sigma_{y_0y_0} = \sigma^2 V_0, \end{aligned} \quad \mathsf{E}(u_0u') = \Sigma_{y_0y} = \sigma^2 W$$

mit nichtstochastischen Regressoren ist der beste (in $y$) lineare unverzerrte Schätzer für $y_0$ (nicht beobachtbar) gegeben durch

$$\widehat{y}_0 = \begin{pmatrix} X_0 & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X' \\ X & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda & \widehat{B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} = \widehat{B} y$$

$$\text{mit} \quad \begin{pmatrix} \Lambda & \widehat{B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X' \\ X & \Sigma_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_0 & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix}, \ \text{d.h.} \quad \begin{aligned} \widehat{B}X &= X_0 \\ \Lambda X' + \widehat{B}\Sigma_{yy} &= \Sigma_{y_0y} \end{aligned}$$

$$= \begin{pmatrix} X_0 & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\beta} \\ \widehat{\gamma} \end{pmatrix} = X_0\widehat{\beta} + \Sigma_{y_0y}\widehat{\gamma}$$

$$\text{mit} \quad \begin{pmatrix} 0 & X' \\ X & \Sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\beta} \\ \widehat{\gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix}, \ \text{d.h.} \quad \begin{aligned} X'\widehat{\gamma} &= 0 \\ X\widehat{\beta} + \Sigma_{yy}\widehat{\gamma} &= y \end{aligned}$$

und

$$\begin{pmatrix} 0 & X' \\ X & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} -F^{-1} & F^{-1}X'\Sigma_{yy}^{-1} \\ \Sigma_{yy}^{-1}XF^{-1} & M \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad F = X'\Sigma_{yy}^{-1}X\,,$$

$$M = \Sigma_{yy}^{-1} - \Sigma_{yy}^{-1}XF^{-1}X'\Sigma_{yy}^{-1}, \quad M\Sigma_{yy}M = M\,,$$

sowie

$$\widehat{B} = \Sigma_{y_0y}\Sigma_{yy}^{-1} - \Lambda X'\Sigma_{yy}^{-1}, \quad \Lambda = (\Sigma_{y_0y}\Sigma_{yy}^{-1}X - X_0)(X'\Sigma_{yy}^{-1}X)^{-1},$$

$$\widehat{\beta} = (X'\Sigma_{yy}^{-1}X)^{-1}X'\Sigma_{yy}^{-1}y, \quad \widehat{\gamma} = \Sigma_{yy}^{-1}(y - X\widehat{\beta})\,,$$

also

$$\widehat{y}_0 = X_0(X'\Sigma_{yy}^{-1}X)^{-1}X'\Sigma_{yy}^{-1}y + \Sigma_{y_0y}My$$

mit der Fehlerkovarianzmatrix

$$\begin{aligned} P_{\widehat{y}_0\widehat{y}_0} &= \mathsf{E}\big((\widehat{y}_0 - y_0)(\widehat{y}_0 - y_0)'\big), \quad \mathsf{E}(\widehat{y}_0) = \widehat{B}\mathsf{E}(y) = \widehat{B}X\beta = X_0\beta = \mathsf{E}(y_0) \\ &= \Sigma_{y_0y_0} + \underbrace{\Sigma_{\widehat{y}_0\widehat{y}_0}}_{\widehat{B}\Sigma_{yy}\widehat{B}' = (\Sigma_{y_0y} - \Lambda X')\widehat{B}' = \Sigma_{y_0y}\widehat{B}' - \Lambda X_0'} - \Sigma_{\widehat{y}_0y_0} - \Sigma_{y_0\widehat{y}_0} = \Sigma_{y_0y_0} - \widehat{B}\Sigma_{yy_0} - \Lambda X_0' = \Sigma_{y_0y_0} - \begin{pmatrix} \Lambda & \widehat{B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_0' \\ \Sigma_{y_0y}' \end{pmatrix} \\ &= \Sigma_{y_0y_0} - \begin{pmatrix} X_0 & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X' \\ X & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} X_0' \\ \Sigma_{y_0y}' \end{pmatrix} \\ &= \Sigma_{y_0y_0} + X_0F^{-1}X_0' - X_0F^{-1}X'\Sigma_{yy}^{-1}\Sigma_{y_0y}' - \Sigma_{y_0y}\Sigma_{yy}^{-1}XF^{-1}X_0' \\ &\qquad - \Sigma_{y_0y}\Sigma_{yy}^{-1}\Sigma_{y_0y}' + \Sigma_{y_0y}\Sigma_{yy}^{-1}XF^{-1}X'\Sigma_{yy}^{-1}\Sigma_{y_0y}' \\ &= (X_0 - \Sigma_{y_0y}\Sigma_{yy}^{-1}X)F^{-1}(X_0 - \Sigma_{y_0y}\Sigma_{yy}^{-1}X)' + \Sigma_{y_0y_0} - \Sigma_{y_0y}\Sigma_{yy}^{-1}\Sigma_{y_0y}'. \end{aligned}$$

## Spezialfälle

(1) $u_0 = 0$, also $\Sigma_{y_0 y_0} = 0$, $\Sigma_{y_0 y} = 0$, $y_0 = X_0\beta = \mu_0$

$$\widehat{\mu}_0 = \begin{pmatrix} X_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X' \\ X & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} = X_0(X'\Sigma_{yy}^{-1}X)^{-1}X'\Sigma_{yy}^{-1}y$$

$$P_{\widehat{\mu}_0\widehat{\mu}_0} = \Sigma_{\widehat{\mu}_0\widehat{\mu}_0} = -\begin{pmatrix} X_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X' \\ X & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} X_0' \\ 0 \end{pmatrix} = X_0(X'\Sigma_{yy}^{-1}X)^{-1}X_0'\,.$$

(2) $u_0 = 0$, $X_0 = X$, also $\Sigma_{y_0 y_0} = 0$, $\Sigma_{y_0 y} = 0$, $y_0 = X\beta = \mu$

$$\widehat{\mu} = \begin{pmatrix} X & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X' \\ X & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} = X(X'\Sigma_{yy}^{-1}X)^{-1}X'\Sigma_{yy}^{-1}y$$

$$P_{\widehat{\mu}\widehat{\mu}} = \Sigma_{\widehat{\mu}\widehat{\mu}} = -\begin{pmatrix} X & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X' \\ X & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} X' \\ 0 \end{pmatrix} = X(X'\Sigma_{yy}^{-1}X)^{-1}X'.$$

(3) $u_0 = 0$, $X_0 = I$, also $\Sigma_{y_0 y_0} = 0$, $\Sigma_{y_0 y} = 0$, $y_0 = \beta$

$$\widehat{\beta} = \begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X' \\ X & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} = (X'\Sigma_{yy}^{-1}X)^{-1}X'\Sigma_{yy}^{-1}y$$

$$P_{\widehat{\beta}\widehat{\beta}} = \Sigma_{\widehat{\beta}\widehat{\beta}} = -\begin{pmatrix} I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X' \\ X & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix} = (X'\Sigma_{yy}^{-1}X)^{-1}.$$

Im empirischen Fall ergibt sich $\widehat{\beta}$ durch Minimierung von $u'V^{-1}u$. Durch die Hinzunahme weiterer Regressoren kann $u'V^{-1}u$ nicht größer werden, siehe auch Anhang A5.

Die Frage ist, ob im nichtempirischen (stochastischen) Fall weitere Variable auch die Prognose nicht verschlechtern oder ob mit weniger Einflussgrößen sogar bessere Ergebnisse erreicht werden können. Zur Beantwortung dieser Frage sei

$$X = \begin{pmatrix} X_2 & X_1 \end{pmatrix}, \quad X_0 = \begin{pmatrix} X_{02} & X_{01} \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_2 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$$

und zu vergleichen ist das obige Modell mit dem „Teil-Modell“

$$\begin{matrix} y^* = X_1\beta_1^* + u^* \\ y_0^* = X_{01}\beta_1^* + u_0^* \end{matrix} \quad \text{mit} \quad \begin{matrix} \mathsf{E}(u^*) = 0,\ \mathsf{E}(u^*u^{*\prime}) = \Sigma_{y^*y^*} = \sigma^{*2}V^*, \\ \mathsf{E}(u_0^*) = 0,\ \mathsf{E}(u_0^*u_0^{*\prime}) = \Sigma_{y_0^*y_0^*} = \sigma^{*2}V_0^*, \end{matrix} \quad \mathsf{E}(u_0^*u^{*\prime}) = \Sigma_{y_0^*y^*} = \sigma^{*2}W^*.$$

Die Beobachtungen von $y$ und $y^*$ sind dieselben, möglicherweise jedoch nicht die zugrunde liegenden Zufallsvariablen (d.h. ihre Kovarianzmatrizen). Insbesondere werden i.a. die Varianzen von $u^*$ bzw. $u_0^*$ größer sein als die von $u$ bzw. $u_0$. Es gilt

$$\widehat{y_0^*} = \begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0^*y^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{y^*y^*} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ y^* \end{pmatrix},$$

$$P_{\widehat{y_0^*}\widehat{y_0^*}} = \Sigma_{y_0^*y_0^*} - \begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0^*y^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{y^*y^*} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} X_{01}' \\ \Sigma_{y_0^*y^*}' \end{pmatrix}.$$

Die Prognose im Gesamt-Modell

$$\widehat{y}_0 = \begin{pmatrix} X_{02} \,|\, X_{01} & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \left(\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & X_2' \\ \hline 0 & 0 & X_1' \\ X_2 & X_1 & \Sigma_{yy} \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{c} 0 \\ \hline 0 \\ y \end{array}\right)$$

im Vergleich mit

$$\widehat{y}_0^* = \begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0^*y^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{y^*y^*} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ y^* \end{pmatrix}$$

erfolgt durch Betrachtung von

$$P_{\widehat{y}_0\widehat{y}_0} = \Sigma_{y_0y_0} - \begin{pmatrix} X_{02} \,|\, X_{01} & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \left(\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & X_2' \\ \hline 0 & 0 & X_1' \\ X_2 & X_1 & \Sigma_{yy} \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{c} X_{02}' \\ \hline X_{01}' \\ \Sigma_{y_0y}' \end{array}\right)$$

$$P_{\widehat{y}_0^*\widehat{y}_0^*} = \Sigma_{y_0^*y_0^*} - \begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0^*y^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{y^*y^*} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} X_{01}' \\ \Sigma_{y_0^*y^*}' \end{pmatrix}.$$

Nun ist

$$\left(\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & X_2' \\ \hline 0 & 0 & X_1' \\ X_2 & X_1 & \Sigma_{yy} \end{array}\right)^{-1} =$$

$$= \begin{pmatrix} -F_1^{-1} & F_1^{-1}(0 \;\; X_2')\begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \\ \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} 0 \\ X_2 \end{pmatrix} F_1^{-1} & \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} - \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} 0 \\ X_2 \end{pmatrix} F_1^{-1}(0 \;\; X_2')\begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \end{pmatrix}$$

mit

$$F_1 = \begin{pmatrix} 0 & X_2' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ X_2 \end{pmatrix} = X_2' M_1 X_2 \,,$$

$$M_1 = \Sigma_{yy}^{-1} - \Sigma_{yy}^{-1} X_1 (X_1' \Sigma_{yy}^{-1} X_1)^{-1} X_1' \Sigma_{yy}^{-1} \,, \quad M_1 \Sigma_{yy} M_1 = M_1$$

und es folgt

$$\begin{aligned} \widehat{y}_0 &= \underbrace{\begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix}}_{\widehat{y}_0^{(1)}} + \\ &\quad + \Bigg( X_{02} - \underbrace{\begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ X_2 \end{pmatrix}}_{\widehat{X}_{02}^{(1)}} \Bigg) F_1^{-1} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & X_2' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix}}_{X_2' M_1 y} \\ &= \widehat{y}_0^{(1)} + (X_{02} - \widehat{X}_{02}^{(1)}) \underbrace{(X_2' M_1 X_2)^{-1} X_2' M_1 y}_{\widehat{\beta}_2} \end{aligned}$$

$$\widehat{y}_0^{(1)} = X_{01} (X_1' \Sigma_{yy}^{-1} X_1)^{-1} X_1' \Sigma_{yy}^{-1} y + \Sigma_{y_0y} M_1 y \;\widehat{=}\; \widehat{y}_0 \;\text{ unter }\; \beta_2 = 0 \,,$$

$$\widehat{X}_{02}^{(1)} = X_{01} (X_1' \Sigma_{yy}^{-1} X_1)^{-1} X_1' \Sigma_{yy}^{-1} X_2 + \Sigma_{y_0y} M_1 X_2 \,,$$

da

$$\begin{pmatrix} \widehat{\beta}_2 \\ \hline \widehat{\beta}_1 \\ \widehat{\gamma} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & X_2' \\ \hline 0 & 0 & X_1' \\ X_2 & X_1 & \Sigma_{yy} \end{array}\right)^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \hline 0 \\ y \end{pmatrix}$$

$$\widehat{\beta}_2 = F_1^{-1}\begin{pmatrix} 0 & X_2' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} = (X_2'M_1X_2)^{-1}X_2'M_1y$$

$$\begin{pmatrix} \widehat{\beta}_1 \\ \widehat{\gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ X_2 \end{pmatrix} \widehat{\beta}_2$$

$$\widehat{\beta}_1 = (X_2'M_1X_2)^{-1}X_1'\Sigma_{yy}^{-1}(y - X_2\widehat{\beta}_2)\,, \quad \widehat{\gamma} = M_1(y - X_2\widehat{\beta}_2)\,.$$

Ferner ist

$$\begin{aligned} P_{\widehat{y}_0\widehat{y}_0} = {} & \Sigma_{y_0y_0} + X_{02}F_1^{-1}X_{02}' - \begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} X_{01}' \\ \Sigma_{y_0y}' \end{pmatrix} \\ & - X_{02}F_1^{-1}\begin{pmatrix} 0 & X_2' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} X_{01}' \\ \Sigma_{y_0y}' \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ X_2 \end{pmatrix} F_1^{-1}X_{02}' \\ & + \begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ X_2 \end{pmatrix} F_1^{-1} \begin{pmatrix} 0 & X_2' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} X_{01}' \\ \Sigma_{y_0y}' \end{pmatrix} \\ = {} & \underbrace{\Sigma_{y_0y_0} - \begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} X_{01}' \\ \Sigma_{y_0y}' \end{pmatrix}}_{P_{\widehat{y}_0^{(1)}\widehat{y}_0^{(1)}} \text{ bez. } y_0 \text{ unter } \beta_2 = 0} \\ & + \Bigg(X_{02} - \underbrace{\begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ X_2 \end{pmatrix}}_{\widehat{X}_{02}^{(1)}}\Bigg) F_1^{-1} \Bigg(X_{02} - \underbrace{\begin{pmatrix} X_{01} & \Sigma_{y_0y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & X_1' \\ X_1 & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ X_2 \end{pmatrix}}_{\widehat{X}_{02}^{(1)}}\Bigg)' \\ = {} & P_{\widehat{y}_0^{(1)}\widehat{y}_0^{(1)}} + (X_{02} - \widehat{X}_{02}^{(1)})(X_2'M_1X_2)^{-1}(X_{02} - \widehat{X}_{02}^{(1)})'. \end{aligned}$$

Daher gilt

$$P_{\widehat{y}_0\widehat{y}_0} - P_{\widehat{y}_0^*\widehat{y}_0^*} = P_{\widehat{y}_0^{(1)}\widehat{y}_0^{(1)}} - P_{\widehat{y}_0^*\widehat{y}_0^*} + (X_{02} - \widehat{X}_{02}^{(1)})(X_2'M_1X_2)^{-1}(X_{02} - \widehat{X}_{02}^{(1)})'.$$

## Folgerung

Tragen die Variablen in $X_2$ nicht wesentlich zur Erklärung von $y_0$ bei, d. h. verringern sich kaum die Varianzen, gilt also

$$\Sigma_{y_0y_0} \approx \Sigma_{y_0^*y_0^*}, \quad \Sigma_{y_0y} \approx \Sigma_{y_0^*y^*} \quad \text{und damit} \quad P_{\widehat{y}_0^*\widehat{y}_0^*} \approx P_{\widehat{y}_0^{(1)}\widehat{y}_0^{(1)}},$$

dann ist

$$P_{\widehat{y}_0\widehat{y}_0} - P_{\widehat{y}_0^*\widehat{y}_0^*} \approx (X_{02} - \widehat{X}_{02}^{(1)})(X_2'M_1X_2)^{-1}(X_{02} - \widehat{X}_{02}^{(1)})' \quad \text{nichtnegativ definit}$$

und die Schätzung im kleinen Modell ist besser als im großen (Parsimonitätsprinzip).

**Beispiel** (Schätzung für $\mu = X\beta$ bzw. $\mu^* = X_1\beta_1^*$)

Das Gesamt-Modell

$$y = X\beta + u = X_1\beta_1 + X_2\beta_2 + u \text{ mit } \mathsf{E}(u) = 0,\ \mathsf{E}(uu') = \Sigma_{yy} = \sigma^2 V$$

im Vergleich mit dem Teil-Modell

$$y^* = X_1\beta_1^* + u^* \text{ mit } \mathsf{E}(u^*) = 0,\ \mathsf{E}(u^*u^{*\prime}) = \Sigma_{y^*y^*} = \sigma^{*2} V^*$$

ergibt für die (Fehler-)Kovarianzmatrizen $P_{\widehat{\mu}\widehat{\mu}} = \Sigma_{\widehat{\mu}\widehat{\mu}}$ bzw. $P_{\widehat{\mu}^*\widehat{\mu}^*} = \Sigma_{\widehat{\mu}^*\widehat{\mu}^*}$ von

$$\begin{aligned}\widehat{\mu} &= X(X'\Sigma_{yy}^{-1}X)^{-1}X'\Sigma_{yy}y \quad \text{bzw.} \quad \widehat{\mu}^* = X_1(X_1'\Sigma_{y^*y^*}^{-1}X_1)^{-1}X_1'\Sigma_{y^*y^*}^{-1}y^* \\ &= \widehat{\mu}^{(1)} + (X_2 - \widehat{X}_2^{(1)})(X_2'M_1X_2)^{-1}X_2'M_1y\,, \quad M_1 = \Sigma_{yy}^{-1} - \Sigma_{yy}^{-1}X_1(X_1'\Sigma_{yy}^{-1}X_1)^{-1}X_1'\Sigma_{yy}^{-1}\end{aligned}$$

mit

$$\widehat{\mu}^{(1)} = X_1(X_1'\Sigma_{yy}^{-1}X_1)^{-1}X_1'\Sigma_{yy}^{-1}y \quad \text{und} \quad \widehat{X}_2^{(1)} = X_1(X_1'\Sigma_{yy}^{-1}X_1)^{-1}X_1'\Sigma_{yy}^{-1}X_2\,,$$

vgl. Zerlegung von $\widehat{y}_0$, den Zusammenhang

$$\Sigma_{\widehat{\mu}\widehat{\mu}} - \Sigma_{\widehat{\mu}^*\widehat{\mu}^*} = \Sigma_{\widehat{\mu}^{(1)}\widehat{\mu}^{(1)}} - \Sigma_{\widehat{\mu}^*\widehat{\mu}^*} + (X_2 - \widehat{X}_2^{(1)})(X_2'M_1X_2)^{-1}(X_2 - \widehat{X}_2^{(1)})',$$

wobei

$$\Sigma_{\widehat{\mu}^{(1)}\widehat{\mu}^{(1)}} = X_1(X_1'\Sigma_{yy}^{-1}X_1)^{-1}X_1', \quad \text{und} \quad \Sigma_{\widehat{\mu}^*\widehat{\mu}^*} = X_1(X_1'\Sigma_{y^*y^*}^{-1}X_1)^{-1}X_1'.$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}\Sigma_{\widehat{\mu}\widehat{\mu}} - \Sigma_{\widehat{\mu}^*\widehat{\mu}^*} = &X_1(X_1'\Sigma_{yy}^{-1}X_1)^{-1}X_1' - X_1(X_1'\Sigma_{y^*y^*}^{-1}X_1)^{-1}X_1' + \\ &+\Sigma_{yy}M_1X_2(X_2'M_1X_2)^{-1}X_2'M_1\Sigma_{yy}.\end{aligned}$$

Werden die Varianzen von $y^*$ im Teil-Modell nicht wesentlich größer als von $y$ im Gesamt-Modell, dann liefert das Teil-Modell bessere Schätzungen für den Mittelwert. Bei gegebenen Kovarianzmatrizen $V$ und $V^*$ gilt für die erwartungstreuen Schätzungen von $\sigma^2$ bzw. $\sigma^{*2}$

$$\begin{aligned}\widehat{\sigma}^2 &= \frac{1}{n-k}\widehat{u}'V^{-1}\widehat{u}\,, \quad \widehat{u} = y - \widehat{\mu} = \Sigma_{yy}My = \Sigma_{yy}M_1y - \Sigma_{yy}M_1X_2(X_2'M_1X_2)^{-1}X_2'M_1y \\ \widehat{\sigma}^{*2} &= \frac{1}{n-k_1}\widehat{u}^{*\prime}V^{*-1}\widehat{u}^*\,, \quad \widehat{u}^* = y^* - \widehat{\mu}^* = \Sigma_{y^*y^*}M_1y^*\end{aligned}$$

und unter Beachtung von $M\Sigma_{yy}M = M$, $M_1\Sigma_{yy}M_1 = M_1$ und Ausmultiplikation bei Zusammenfassung der letzten drei Terme ergibt sich

$$\begin{aligned}\widehat{u}'V^{-1}\widehat{u} &= \sigma^2y'My = \sigma^2y'M_1y - \sigma^2y'M_1X_2(X_2'M_1X_2)^{-1}X_2'M_1y \\ \widehat{u}^{*\prime}V^{*-1}\widehat{u}^* &= \sigma^{*2}y^{*\prime}M_1^*y^*, \quad M_1^* = \Sigma_{y^*y^*}^{-1} - \Sigma_{y^*y^*}^{-1}X_1(X_1'\Sigma_{y^*y^*}^{-1}X_1)^{-1}X_1'\Sigma_{y^*y^*}^{-1}.\end{aligned}$$

Die erste Gleichung zeigt, dass die empirische gewichtete Restquadratsumme, gegeben durch $\widehat{u}^{(1)\prime}V^{-1}\widehat{u}^{(1)} = \sigma^2y'M_1y$ mit $\widehat{u}^{(1)} = y - \widehat{\mu}^{(1)}$, nicht größer werden kann, wenn in einem Modell weitere Einflussgrößen hinzukommen.

Speziell für $V = V^*$ gilt

$$\Sigma_{\widehat{\mu}\widehat{\mu}} - \Sigma_{\widehat{\mu}^*\widehat{\mu}^*} = (\sigma^2 - \sigma^{*2}) X_1 (X_1' V^{-1} X_1)^{-1} X_1' + \sigma^2 V \widetilde{M}_1 X_2 (X_2' \widetilde{M}_1 X_2)^{-1} X_2' \widetilde{M}_1 V$$

mit

$$\widetilde{M}_1 = \sigma^2 M_1 = V^{-1} - V^{-1} X_1 (X_1' V^{-1} X_1)^{-1} X_1' V^{-1}, \;\; \widetilde{M}_1 V \widetilde{M}_1 = \widetilde{M}_1,$$
$$\widetilde{M} = \sigma^2 M = V^{-1} - V^{-1} X (X' V^{-1} X)^{-1} X' V^{-1}, \;\; \widetilde{M} V \widetilde{M} = \widetilde{M}.$$

Bezüglich der gewichteten Spur-Norm ergibt sich

$$\begin{aligned}
&\mathrm{sp}(V^{-\frac{1}{2}}(\Sigma_{\widehat{\mu}\widehat{\mu}} - \Sigma_{\widehat{\mu}^*\widehat{\mu}^*}) V^{-\frac{1}{2}}) = \\
&= (\sigma^2 - \sigma^{*2}) \underbrace{\mathrm{sp}(V^{-\frac{1}{2}} X_1 (X_1' V^{-1} X_1)^{-1} X_1' V^{-\frac{1}{2}})}_{\mathrm{sp}(\mathrm{I}_{k_1}) = k_1} + \sigma^2 \underbrace{\mathrm{sp}(V^{\frac{1}{2}} \widetilde{M}_1 X_2 (X_2' \widetilde{M}_1 X_2)^{-1} X_2' \widetilde{M}_1 V^{\frac{1}{2}})}_{\mathrm{sp}(\mathrm{I}_{k_2}) = k_2} \\
&= k\,\sigma^2 - k_1\,\sigma^{*2},
\end{aligned}$$

wenn $X_1$ eine $n \times k_1$ Matrix und $X_2$ eine $n \times k_2$ Matrix sowie $k = k_1 + k_2$ ist. Damit gilt

$$\mathrm{sp}(V^{-\frac{1}{2}}(\Sigma_{\widehat{\mu}\widehat{\mu}} - \Sigma_{\widehat{\mu}^*\widehat{\mu}^*}) V^{-\frac{1}{2}}) \geq 0 \;\; \Leftrightarrow \;\; k\,\sigma^2 - k_1\,\sigma^{*2} \geq 0 \;\text{ bzw. }\; \sigma^{*2} \leq \frac{k}{k_1}\sigma^2 = \big(1 + \frac{k_2}{k_1}\big)\sigma^2.$$

Ist also die Varianz $\sigma^{*2}$ im kleinen Modell gegenüber der Varianz $\sigma^2$ im großen Modell nicht wesentlich höher, dann liefert das kleine Modell eine bessere Schätzung für den Mittelwert.

Werden für die Varianzen beispielsweise die erwartungstreuen Schätzwerte eingesetzt, so gilt bei gleicher Beobachtung $y = y^*$

$$k\,\widehat{\sigma}^2 - k_1\,\widehat{\sigma}^{*2} = y' \widetilde{M} y \Big( \frac{k}{n-k} - \frac{k_1}{n-k_1} \underbrace{\frac{y' \widetilde{M}_1 y}{y' \widetilde{M} y}}_{Q \geq 1} \Big) \geq 0$$

genau dann, wenn

$$Q \leq \frac{k(n-k_1)}{k_1(n-k)} = 1 + \frac{k_2}{k_1} \frac{n}{n-k}$$

und der Quotient

$$Q = 1 + \frac{y' \widetilde{M}_1 X_2 (X_2' \widetilde{M}_1 X_2)^{-1} X_2' \widetilde{M}_1 y}{y' \widetilde{M}_1 y}$$

ist nahe bei 1 und erfüllt somit die Ungleichung, wenn die weiteren Variablen in $X_2$ keinen bedeutenden zusätzlichen Beitrag zur Erklärung von $y$ liefern.

### Zusammenfassung

Obwohl empirisch die Restquadratsumme mit weiteren Einflussgrößen nicht größer werden kann, ist im Sinne der statistischen Modelltheorie von der Verwendung unbedeutender Einflussgrößen abzuraten. Wenige wesentliche Einflussgrößen führen in der Regel zu besseren Prognosen $\widehat{y}_0$. Die Fehler in kleinen effizienten Modellen sind im Allgemeinen geringer als bei großen, ebenfalls nicht exakten Modellen.

Ähnliche Aussagen gelten, wenn im Gesamt-Modell die verzerrte Prognose $\widehat{y}_0^*$ oder im Teilmodell die verzerrte Prognose $\widehat{y}_0$ verwendet wird. Sobald unwesentliche Einflussgrößen in das Modell hinzugenommen werden, die die Varianzen kaum reduzieren, verschlechtert sich die Prognosegüte.

# Literatur


Brunswig, D. (2000): Die Immissionsanalyse gewässerkundlicher Monitoringdaten mit dem Simulationsmodell Transpos: Frachtberechnung, Frachtnormierung und Trendanalyse. In: Fehr (2000), 159-201.

Fehr, G. (Hrsg.) (2000): Nährstoffbilanzen für Flußeinzugsgebiete. Ein Beitrag zur Umsetzung der EU-Wasserrahmenrichtlinie. Wiesbaden: Vieweg.

Gölz, E., Schmidt, A. (Projektleiter) (2003): Bedeutung der Nebenflüsse für den Feststoffhaushalt der Elbe - Abschlussbericht. Koblenz: Bundesanstalt für Gewässerkunde, BfG-1382

Hebbel, H. (2000): Theorie der Frachtberechnung und -standardisierung in der Wassergütewirtschaft - Entwurf von Zeitstichprobenplänen-. Discussion Papers in Statistics and Quantitative Economics Nr. 91 (Eds. Hauptmann, H., Krumbholz, W.), Universität der Bundeswehr Hamburg.

Hebbel, H. (2006): Die systematische Stichprobe zur Schätzung zweiter Momente in kontinuierlichen Grundgesamtheiten. Discussion Papers in Statistics and Quantitative Economics Nr. 118 (Eds. Hauptmann, H., Krumbholz, W.), Universität der Bundeswehr Hamburg.

Hebbel, H., Steuer, D. (2001): Sampling for Continuous (Space-time) Processes. In: Mathematical Statistics with Applications in Biometry - Festschrift in Honour of Prof. Dr. Siegfried Schach (Eds. J. Kunert, G. Trenkler), 277-291. Lohmar, Köln: Eul.

Heininger, P., Schild, R., u. a. (2002): Ermittlung der gewässerseitigen Einträge von polyzyklischen Aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAKs) in die Nordsee auf der Basis einer harmonisierten Methodik (internationales Pilotprojekt). Berlin: Umweltbundesamt Texte 56/02, UBA-FB 000343.

Heininger, P., Schild, R., a. o. (2002): International Pilot Study for the determination of Riverine Inputs of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) to the Maritime Atea on the basis of a harmonised methodology - Final Report. Berlin: Federal Environmental Agency (Umweltbundesamt) Texte 57/02, UBA-FB 000343e.

Hilden, M. (Bearbeiter) (2003): Ermittlung von Stoff-Frachten in Fließgewässern - Probenahmestrategien und Berechnungsverfahren. (Hrsg. Länderarbeitsgemeinschaft Wasser LAWA), Berlin: Kulturbuch-Verlag.

Keller, M., Hilden, M., Joost, M. (1997): Vergleich von Schätzmethoden für jährliche Stofffrachten am Beispiel des IKSR-Meßprogrammes 1995. Koblenz: Bundesanstalt für Gewässerkunde, BfG-1078.

Richards, R.P. (1998): Estimation of Pollutant Loads in Rivers and Streams: A Guidance Document for NPS Programs. Project Report prepared under Grant X998397-01-0, U.S. Environmental Protection Agency, Region VIII, Denver.

Schreiber, W., Krauß-Kalweit, I. (1999): Frachten von Wasserinhaltsstoffen in Fließgewässern - Einfluß der Probenahmestrategie auf die Ermittlung. Wasserwirtschaft 89, 520-529.

Steinebach, G. (1994): Zur Ermittlung von jährlichen Stofffrachten in großen Fließgewässern am Beispiel der IKSR-Zahlentafeln. Koblenz: Bundesanstalt für Gewässerkunde, BfG-0827

Symader, W. (1988): Zur Problematik der Frachtermittlung. Vom Wasser 71, 145-161.

Symader, W., Strunk, N. (1991): Die zeitliche Dynamik des Schwebstofftransports und seine Bedeutung für die Gewässerbeschaffenheit. Vom Wasser 77, 159-169.

Uhlig, S., Kuhbier, P. (2001): Methoden der Trendabschätzung zur Überprüfung von Reduktionszielen im Gewässerschutz. Berlin: Umweltbundesamt Texte 49/01, UBA-FB 000204.

Uhlig, S., Kuhbier, P. (2001): Trend methods for the assessment of effectiveness of reduction measures in the water system. Berlin: Federal Environmental Agency (Umweltbundesamt) Texte 80/01, UBA-FB 000204/e.

bis hier zitiert

INPUT (2000): The Comprehensive Study on Riverine Inputs - (RID) Principles. Lisbon 17-21 January: INPUT 00/7/info.1-E.

Klopp, R. (1986): Über die Ermittlung von Frachten in Fließgewässern. Vom Wasser 66, 149-158.