

DIN CEN/TS 17458

Dieses Dokument ist Bestandteil des VDI/DIN-Handbuches Reinhaltung der Luft, Band 1b.
ICS 13.040.01

**Außenluft –
Methodik zur Erfassung der Leistungsfähigkeit von Systemanwendungen
zur Quellenzuordnung;
Deutsche Fassung CEN/TS 17458:2020**

Ambient air –

Methodology to assess the performance of receptor oriented source apportionment modelling applications for particulate matter;

German version CEN/TS 17458:2020

Air ambiant –

Méthode d'évaluation de la performance d'applications d'un système de modélisation de la contribution des sources de particules en suspension de type "récepteur-orienté";

Version allemande CEN/TS 17458:2020

Gesamtumfang 33 Seiten

VDI/DIN-Kommission Reinhaltung der Luft (KRdL) - Normenausschuss

Nationales Vorwort

Dieses Dokument (CEN/TS 17458:2020) wurde im Europäischen Komitee für Normung (CEN) in der Arbeitsgruppe WG 44 „Außenluft – Quellenzuordnung“ (Sekretariat: DIN, Deutschland) des Technischen Komitees CEN/TC 264 „Luftbeschaffenheit“ (Sekretariat: DIN, Deutschland) unter Mitwirkung deutscher Experten, die von der VDI/DIN-Kommission Reinhaltung der Luft (KRdL) – Normenausschuss – benannt worden sind, erarbeitet.

Das zuständige deutsche Normengremium ist der Unterausschuss NA 134-02-01-60 UA „Spiegelgremium zu CEN/TC 264/WG 43 und CEN/TC 264/WG 44“ der VDI/DIN-Kommission Reinhaltung der Luft (KRdL) – Normenausschuss.

Technische Spezifikationen sind nicht Bestandteil des Deutschen Normenwerks.

Eine Technische Spezifikation ist das Ergebnis einer Normungsarbeit, das wegen bestimmter Vorbehalte zum Inhalt oder wegen des gegenüber einer Norm abweichenden Aufstellungsverfahrens von DIN noch nicht als Norm herausgegeben wird.

Zur vorliegenden Technische Spezifikation wurde kein Entwurf veröffentlicht.

Erfahrungen mit dieser Technische Spezifikation sind erbeten:

- vorzugsweise als Datei per E-Mail an krdl@din.de in Form einer Tabelle. Die Vorlage dieser Tabelle kann im Internet unter www.din.de/stellungnahme abgerufen werden;
- oder in Papierform an die VDI/DIN-Kommission Reinhaltung der Luft (KRdL) — Normenausschuss; Postfach 10 11 39; 40002 Düsseldorf.

Aktuelle Informationen zu diesem Dokument können über die Internetseiten von DIN (www.din.de) durch eine Suche nach der Dokumentennummer aufgerufen werden.

Deutsche Fassung

Außenluft —
Methodik zur Erfassung der Leistungsfähigkeit von
Systemanwendungen zur Quellenzuordnung

Ambient air —
Methodology to assess the performance of receptor
oriented source apportionment modelling applications
for particulate matter

Air ambient —
Méthode d'évaluation de la performance d'applications
d'un système de modélisation de la contribution des
sources de particules en suspension de type
"récepteur-orienté"

Diese Technische Spezifikation (CEN/TS) wurde vom CEN am 24. Februar 2020 als eine künftige Norm zur vorläufigen Anwendung angenommen.

Die Gültigkeitsdauer dieser CEN/TS ist zunächst auf drei Jahre begrenzt. Nach zwei Jahren werden die Mitglieder des CEN gebeten, ihre Stellungnahmen abzugeben, insbesondere über die Frage, ob die CEN/TS in eine Europäische Norm umgewandelt werden kann.

Die CEN Mitglieder sind verpflichtet, das Vorhandensein dieser CEN/TS in der gleichen Weise wie bei einer EN anzukündigen und die CEN/TS verfügbar zu machen. Es ist zulässig, entgegenstehende nationale Normen bis zur Entscheidung über eine mögliche Umwandlung der CEN/TS in eine EN (parallel zur CEN/TS) beizubehalten.

CEN-Mitglieder sind die nationalen Normungsinstitute von Belgien, Bulgarien, Dänemark, Deutschland, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Kroatien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, den Niederlanden, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, der Republik Nordmazedonien, Rumänien, Schweden, der Schweiz, Serbien, der Slowakei, Slowenien, Spanien, der Tschechischen Republik, der Türkei, Ungarn, dem Vereinigten Königreich und Zypern.



EUROPÄISCHES KOMITEE FÜR NORMUNG
EUROPEAN COMMITTEE FOR STANDARDIZATION
COMITÉ EUROPÉEN DE NORMALISATION

CEN-CENELEC Management-Zentrum: Rue de la Science 23, B-1040 Brüssel

Inhalt

	Seite
Europäisches Vorwort	4
1 Anwendungsbereich	5
2 Normative Verweisungen	6
3 Begriffe	6
4 Symbole und Abkürzungen	8
5 Grundlagen der Bewertungsmethodiken	9
6 Prüfungspaletten	10
7 Das Verfahren zur Erfassung der Leistungsfähigkeit	11
7.1 Evaluierungsdatensätze	11
7.2 Bestimmung der SCE-Referenzwerte und ihrer Standardunsicherheiten	11
7.2.1 Sollwert basierend auf Teilnehmerwerten	11
7.2.2 Formulierung eines Sollwertes eines synthetischen Datensatzes	11
8 Leistungsindikatoren und andere Indikatoren	12
8.1 Ergänzende Indikatoren	12
8.1.1 Allgemeines	12
8.1.2 Zugeordnete Schadstoffmasse	12
8.1.3 Anzahl der identifizierten Quellen	12
8.2 Ähnlichkeitsindikatoren	13
8.2.1 Allgemeines	13
8.2.2 Pearson-Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient	13
8.2.3 Standardisierte Identitätsdistanz (SID, Anhang I)	14
8.2.4 Gewichtete Distanz (WD)	14
8.3 Leistungskenngrößen	15
8.3.1 Allgemeines	15
8.3.2 z-Werte für die Durchschnitts-SCE	15
8.3.3 RMSE _Q für die SCE-Zeitreihe	16
8.3.4 Zeta-Wert für die Unsicherheit der SCE	16
Anhang A (informativ) Prinzip rezeptororientierter Modelle	17
Anhang B (informativ) Empfohlene Schritte für Quellzuordnungs-Studien mit rezeptororientierten Modellen	18
Anhang C (informativ) Quellen der Unsicherheit rezeptororientierter Modelle	19
Anhang D (informativ) Prüfungspaletten für individuelle Quellzuordnungs-Durchführungen (Verantwortlich: Anwender)	20
Anhang E (normativ) Prüfungspaletten für Vergleichsstudien (Verantwortlich: Koordinator)	21
Anhang F (normativ) Berechnung der SCE-Referenzwerte X_{kt} und X_k in realen Datensätzen	22
Anhang G (informativ) Robuster Durchschnitt und Standardabweichung	23
Anhang H (informativ) Akzeptanzbereich für ergänzende Prüfungen	24
Anhang I (informativ) Geometrische Bedeutung der standardisierten Identitätsdistanz	25
Anhang J (normativ) Akzeptanzbereich für Ähnlichkeits- und Leistungsprüfungen	27

Anhang K (informativ) Organisation und Dokumentation der Vergleichsstudien	28
Literaturhinweise.....	30

Europäisches Vorwort

Dieses Dokument (CEN/TS 17458:2020) wurde vom Technischen Komitee CEN/TC 264 „Luftbeschaffenheit“ erarbeitet, dessen Sekretariat von DIN gehalten wird.

Es wird auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einige Elemente dieses Dokuments Patentrechte berühren können. CEN ist nicht dafür verantwortlich, einige oder alle diesbezüglichen Patentrechte zu identifizieren.

Entsprechend der CEN-CENELEC-Geschäftsordnung sind die nationalen Normungsinstitute der folgenden Länder gehalten, diese Technische Spezifikation anzukündigen: Belgien, Bulgarien, Dänemark, Deutschland, die Republik Nordmazedonien, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Kroatien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, Niederlande, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, Rumänien, Schweden, Schweiz, Serbien, Slowakei, Slowenien, Spanien, Tschechische Republik, Türkei, Ungarn, Vereinigtes Königreich und Zypern.

1 Anwendungsbereich

Die Europäische Luftqualitätsrichtlinie (Directive on ambient air quality and cleaner air for Europe) (2008/50/EG; AQD) definiert verschiedene Anwendungsgebiete für die Modellierung: Beurteilung, Planung, Vorhersage und Quellzuordnung (engl. source apportionment, SA). Dieses Dokument bezieht sich auf die Quellzuordnungs-Modellierung und spezifiziert Methoden zur Beurteilung, ob festgelegte Gütekriterien für die rezeptororientierten Quellzuordnungsmodelle (Rezeptormodelle, RM) erfüllt werden. Der Anwendungsbereich für die Methoden nach diesem Dokument beschreibt die Leistungsbeurteilung der Quellzuordnung partikulären Materials (PM) mithilfe rezeptororientierter Quellmodellierung (RM) im Kontext der Europäischen Richtlinien 2004/107/EG und AQD einschließlich des Durchführungsbeschlusses der europäischen Kommission 2011/850/EU vom 12. Dezember 2011. Die Anwendung der RM quantifiziert nicht die räumliche Quelle des PM, somit umfasst dieses Dokument keine Prüfung der räumlichen Quellzuordnung.

Dieses Dokument wendet sich an Nutzer der RM: Anwender individueller Quellzuordnungsstudien sowie Teilnehmer und Organisatoren von Quellzuordnungsvergleichsstudien. Dieses Dokument ist für die Auswertung der Ergebnisse eines spezifischen Modellierungssystems zur Quellzuordnung mit Hinsicht auf Referenzwerte (*a priori* bekannt oder auf Grundlage der Vergleichswerte der Teilnehmer berechnet) in den folgenden Anwendungsbereichen geeignet:

- Erfassung der Leistungsfähigkeit und Unsicherheiten eines Modellierungssystems oder der Einrichtung eines Modellierungssystems durch Verwendung der in diesem Dokument dargelegten Indikatoren.
- Prüfen und Vergleichen verschiedener Quellzuordnungsergebnisse in einer spezifischen Situation (Verwenden eines Evaluierungsdatensatzes) mithilfe der in dieser CEN/TS dargelegten Indikatoren.
- QA/QC-Prüfungen bei jeder Verwendung eines Modellierungssystems durch einen Anwender.

Es sollte zur Verdeutlichung beachtet werden, dass die in diesem Dokument dargestellten Verfahren und Berechnungen nicht für die Prüfung der Leistungsfähigkeit eines spezifischen Quellzuordnungs-Modellierungsergebnisses verwendet werden können, ohne *a priori* Referenzinformation über die Beiträge der Quellen/Quellenkategorien zu haben.

ANMERKUNG Die Anwendung dieses Dokuments impliziert, dass die Vergleichsprüfung von einer Institution organisiert und koordiniert ist, die über die nötige technische Ausstattung und Unabhängigkeit verfügt; die Definition einer solchen Institution geht über den Anwendungsbereich dieses Dokuments hinaus.

Die Grundsätze der RM sind in Anhang A zusammengefasst. Eine Übersicht über Messunsicherheitsquellen und Empfehlungen zu Schritten, die in Quellzuordnungsstudien zu befolgen sind, sind in Anhang B und Anhang C dargestellt. Für weitere Informationen zu Quellzuordnungsmethodiken, siehe zum Beispiel [1; 2; 3].

Es gibt neben RM auch andere Methodiken, die häufig zur Quellzuordnung verwendet werden, z. B. quellorientierte Modelle. Diese anderen Methodiken decken Aspekte der Quellzuordnung ab, die von der AQD gefordert und von der RM nicht behandelt werden (z. B. Zuordnung von Schadstoffen zu geographischen Emissionsgebieten). Die Einschätzung der Güte dieser Methodiken liegt außerhalb des Anwendungsbereichs dieses Dokuments.

2 Normative Verweisungen

Die folgenden Dokumente, die in diesem Dokument teilweise oder als Ganzes zitiert werden, sind für die Anwendung dieses Dokuments erforderlich. Bei datierten Verweisungen gilt nur die in Bezug genommene Ausgabe. Bei undatierten Verweisungen gilt die letzte Ausgabe des in Bezug genommenen Dokuments (einschließlich aller Änderungen).

ISO 13528:2015, *Statistical methods for use in proficiency testing by interlaboratory comparisons*

3 Begriffe

Für die Anwendung dieses Dokuments gelten die folgenden Begriffe.

ISO und IEC stellen terminologische Datenbanken für die Verwendung in der Normung unter den folgenden Adressen bereit:

- ISO Online Browsing Platform: verfügbar unter <http://www.iso.org/obp>
- IEC Electropedia: verfügbar unter <http://www.electropedia.org/>

3.1

Kandidat-Modellierungssystem

Modellierungssystem, das in der Vergleichsprüfung geprüft oder isoliert angewendet wird

3.2

Kandidat-Quelle

jede Quelle oder Quellenkategorie, die im Ergebnis eines Quellzuordnungs-Kandidat-Modellierungssystems enthalten ist, welches mit der in diesem Dokument beschriebenen Methodik geprüft wird

3.3

Koordinator

Organisation, die für die Koordination der Durchführung einer Vergleichsprüfung verantwortlich ist

3.4

Beitrag zu Spezies

Anteil der Masse jedes einzelnen chemischen Elements oder jeder chemischen Verbindung, die Teil eines (zusammengesetzten) Schadstoffs ist, der einer Quelle oder Quellenkategorie zugeordnet ist, ausgedrückt in Prozent seiner Gesamtmasse

Anmerkung 1 zum Begriff: Abhängig von der Art der Anwendung der Quellzuordnungsmodellierung kann dieses Konzept wie folgt bezeichnet werden: „contribution by species“ in CMB 8.2, „explained variation“ in PMF 2, „percentage of species total matrix“ in EPA PMF v3, und „factor fingerprint“ in EPA-PMF v5.

3.5

Inputunsicherheit

statistische Streuung der Werte, die jeder einzelnen Luftkonzentration einer Spezies in der Inputmatrix rezeptororientierter Modelle in angemessener Weise zugeordnet werden kann

3.6

abgeleitetes Quellprofil

relative chemische Zusammensetzung der Quelle oder Quellenkategorie, die aus einer Anwendung der Quellzuordnungsmodellierung resultiert, ausgedrückt als Anteil je Masseneinheit jeder chemischen Spezies in Bezug zu der Gesamtquell- oder Gesamtquellenkategoriemasse

3.7

Faktor

zugrundeliegende latente Variable, die durch ein Quellzuordnungsmodell mit multivariater Analyse (z. B. Faktoranalyse oder Singulärwertzerlegung) identifiziert wird, und mit einer Quelle oder einer Quellenkategorie assoziiert ist

3.8

maximal anerkannter Abstand

maximaler euklidischer Abstand auf einer kartesischen Ebene zwischen dem Punkt, der die Werte (Konzentrationsverhältnisse) einer chemischen Spezies in zwei Quellprofilen darstellt (eine auf der Abszisse und der andere auf der Ordinate), und der Kennlinie, welche als akzeptabler Indikator für die Ähnlichkeit der zwei Werte gilt

3.9

Outputunsicherheit

Unsicherheit der mittleren Quellbeitragsschätzung (SCE, en: source contribution estimate), ausgedrückt in denselben Einheiten, für ein bestimmtes Zeitfenster einer Quelle oder Quellenkategorie in einem Anwendungsergebnis der Quellzuordnung

3.10

rezeptororientierte Modelle

Modelle, die in einem definierten Zeitfenster gemessenen Schadstoffkonzentrationen an einem gegebenen Standort (Rezeptor) als Input verwenden und mithilfe einer multivariaten Analyse Quellbeitragsschätzungen bereitstellen

3.11

Referenzquellprofil

Quellprofil, verwendet als Referenz für die Ähnlichkeitsprüfungen abgeleiteter Quellprofile. Im Allgemeinen handelt es sich bei den Referenzquellprofilen um chemische Profile, die aus Proben stammen, die speziell zur Charakterisierung der Quelle oder Quellenkategorie gesammelt wurden und in der Literatur oder in öffentlichen Verzeichnissen (z. B. SPECIATE, SPECIEUROPE) verfügbar sind

3.12

Referenzwert

a priori bekannte oder berechnete Quellbeitragsschätzung, die einer durch einen Evaluierungsdatensatz repräsentierte Quelle oder Quellenkategorie zugeordnet ist

3.13

Ergebnisse

Output, der durch die Durchführung eines Kandidat-Modellierungssystems unter Verwendung eines Evaluierungsdatensatzes ermittelt wird. Die Ergebnisse der Quellzuordnung bestehen z. B. aus Quellbeitragsschätzungen einschließlich ihrer Outputunsicherheit, dem abgeleiteten Quellprofil, Zeitreihen der Quellbeitragsschätzung und Beitrag zu Spezies

3.14

Quellzuordnung

SA, en: source apportionment

Praxis, quantitative Informationen über den Beitrag der Quellen und/oder Quellenkategorien zu Schadstoffkonzentrationen an einer bestimmten Stelle oder einem bestimmten Gebiet in einem bestimmten Zeitfenster herzuleiten

3.15

Quellenkategorie

Gruppe von Luftverunreinigungs-Quellen desselben Typs, die durch ähnliche chemische Zusammensetzung und/oder ähnlichen zeitlichen Verlauf gekennzeichnet sind

3.16

Quellbeitragsschätzung

SCE, en: source contribution estimate, SCE

Menge des Schadstoffs, ausgedrückt als Massenkonzentration (z. B. $\mu\text{g m}^{-3}$), die in den Ergebnissen der Anwendung einer Quellzuordnungsmodellierung einer spezifischen Quelle oder Quellenkategorie zugeordnet wird

3.17

Quelle der Luftverunreinigung

jede menschliche Aktivität oder jeder natürliche Prozess, die/der die Freisetzung von Schadstoffen in die Atmosphäre oder die Bildung von Schadstoffen in der Atmosphäre verursacht

3.18

Quellprofil

relative chemische Zusammensetzung eines (zusammengesetzten) Schadstoffs, emittiert von einer Quelle, ausgedrückt als Verhältnis der Masse einer jeden chemischen Spezies zur Gesamtmasse des Schadstoffs

3.19

quellorientierte Modelle

Modelle, die ausgehend von Emissionskatastern, meteorologischen Feldern und Randbedingungen die physikalischen und/oder chemischen atmosphärischen Prozesse simulieren, die auf die emittierten Schadstoffe wirken

3.20

Spezies

einzelne chemische Elemente oder Verbindungen, die den untersuchten Schadstoff bilden, sofern es sich dabei um eine Gruppe von Verbindungen oder ein Aggregat (Verbund) handelt

3.21

Schadstoff

Sammelbegriff für die Gesamtmasse der Substanz, für die die Quellbeitragsschätzung mithilfe der Quellzuordnungsverfahren bestimmt wird

Anmerkung 1 zum Begriff: Es kann sich um eine einfache chemische Verbindung (z. B. Hg), eine Gruppe ähnlicher chemischer Verbindungen (z. B. polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe) oder einen Verbund: d.h. eine Anhäufung verschiedener chemischer Verbindungen (z. B. PM), handeln.

4 Symbole und Abkürzungen

fr	gefunden-Referenz-Prüfungen, Vergleichstest zwischen ermittelten Werten und Referenzwerten (en: found-reference)
ff	gefunden-gefunden-Prüfungen, Vergleichstest zwischen ermittelten Werten (en: found-found)
M_t	Summe der SCE aller Kandidat-Quellen k im Zeitschritt t eines bestimmten Ergebnisses
M	Summe der zeitlich gemittelten SCE aller Kandidat-Quellen k eines bestimmten Ergebnisses
O_t	beobachtete Massenkonzentration des Schadstoffs im Zeitschritt t
O	zeitlicher Mittelwert der beobachteten Massenkonzentration des Schadstoffs
Pearson	Pearson-Produkt-Moment-Korrelationskoeffizient (r_{xy})
RM	rezeptororientiertes Quellzuordnungsmodell