

Relaties in de meting van de waterkwaliteit*

Volgens v. Dale is een kwaliteit een hoedanigheid van stoffen en waren met betrekking tot het gebruik dat ervan gemaakt moet worden. Hieruit blijkt al dat het bepalen van de hoedanigheid (de meting) gerelateerd is aan de gebruikseigenschappen van de waar (het object). Uiteraard zal iemand moeten vaststellen welke hoedanigheden bepaald moeten worden t.a.v. welk gebruik, er is dus een opdrachtgever.

Deze relatie kan weergegeven worden met het schema van afb. 1.

Voor de kwaliteitsmeting is het van belang



PROF. DRs. G. KATEMAN
Katholieke Universiteit
Nijmegen

om de relaties tussen deze drie componenten, object, meter en opdrachtgever, te kennen om aan de hand daarvan een zo goed mogelijke strategie te kunnen bepalen. De eerste stap in deze strategie bepaling is het eenduidig vastleggen van de drie componenten.

De opdrachtgever

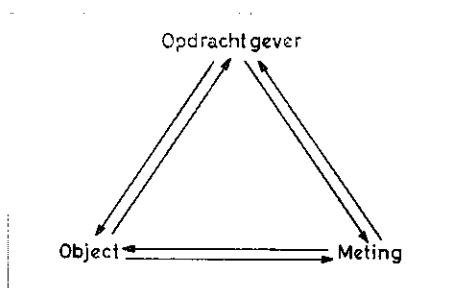
Zoals gezegd is de opdrachtgever degene die vaststelt welke kwaliteit of deelkwaliteit gemeten moet worden. Verder bepaalt de opdrachtgever het doel van de meting, te onderscheiden in beschrijven, bewaken en regelen.

Beschrijven kan zijn het omschrijven van het object als geheel, bijv. de totale hoeveelheid fosfaat die per jaar met de Rijn ons land binnenkomt, of de reconstructie van het object in detail, bijv. het fosfaatgehalte van een effluent als functie van de tijd of het fosfaatgehalte van een meer als functie van de plaats.

Een beschrijving is te kwantificeren, door de fout waarmee een reconstructie van het object uit metingen is behept t.o.v. de werkelijkheid.

Een tweede doelstelling van de opdrachtgever kan zijn bewaken. Bewaken is te kwantificeren met bijv. de afstand tussen metingen die nog tolerabel is om met een bepaalde nauwkeurigheid het overschrijden van een grenswaarde te kunnen detecteren of als de nauwkeurigheid waarmee een overschrijding vastgesteld kan worden, gegeven een bepaalde analysefrequentie. Een derde doelstelling kan zijn het regelen,

* Samenvatting van een lezing van prof. drs. G. Kateman, gehouden op het symposium 'De filosofie achter de meting van de waterkwaliteit' georganiseerd door VWN, NVA en de afdeling gezondheidstechniek van het KIVI op 8 november 1977.



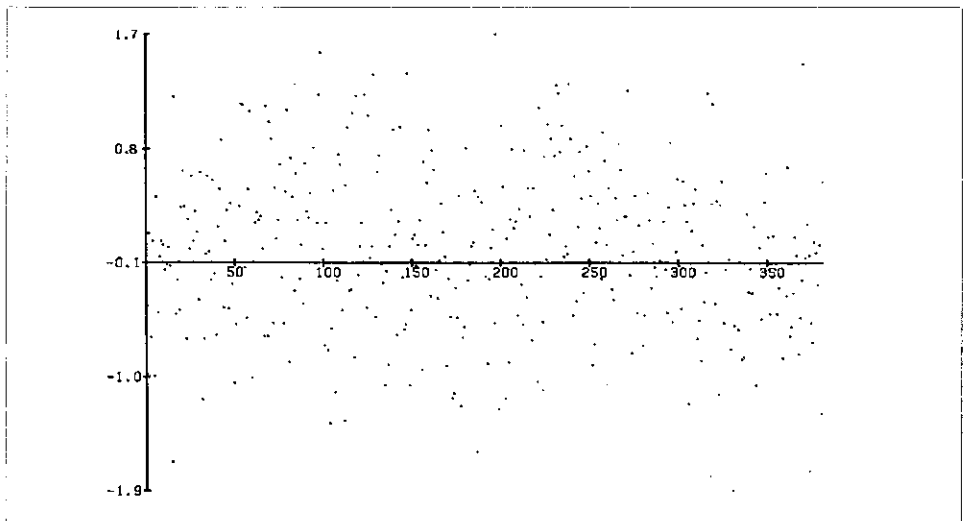
Afb. 1 - Relaties in de kwaliteitsmeting.

het op basis van metingen in overeenstemming brengen van de actuele kwaliteit met een streefwaarde. Regelen is te kwantificeren met de afname van de variatie van het geregelde object t.o.v. de ongeregelde situatie.

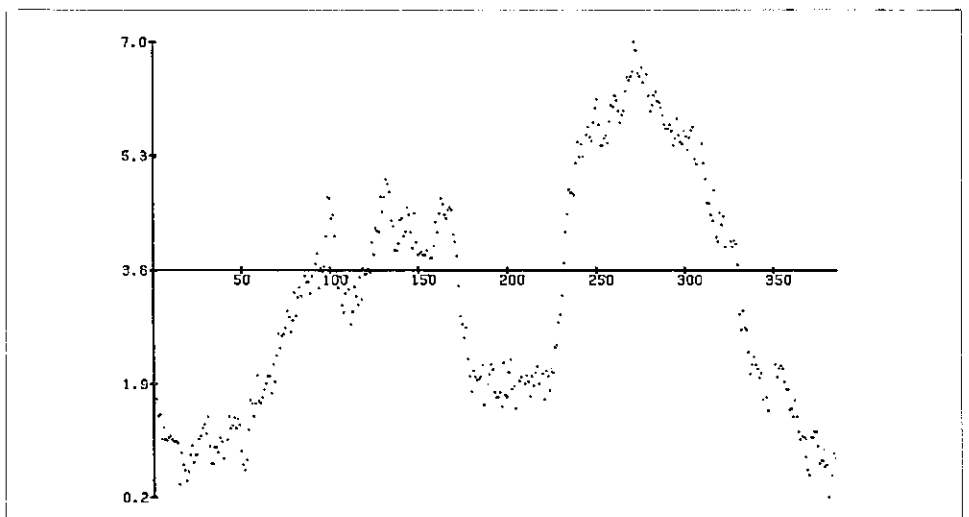
Het object

Kenmerken van het object die voor de meting belangrijk zijn, zijn variantie-amplitude σ_x en -snelheid T_x . Deze kunnen

Afb. 2a - Een ongecorrleerde waarnemingsreeks.



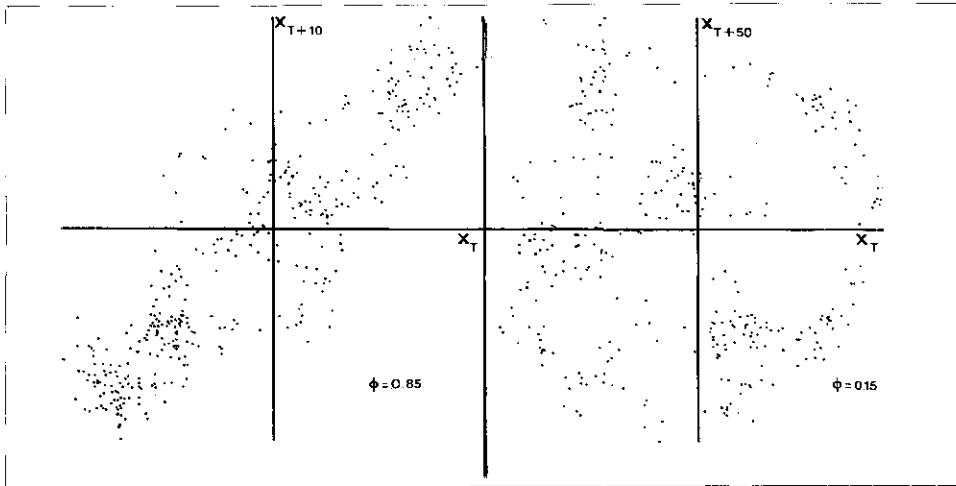
Afb. 2b - Een gecorrleerde waarnemingsreeks.



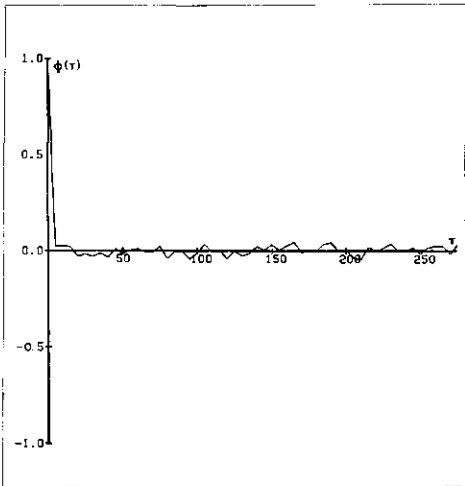
op meerdere manieren gekwantificeerd worden. De bekendste zijn:

- door Fourier analyse: de te meten kwaliteit wordt ontleed in sinus- en cosinus golven van bepaalde amplitude en frequentie;
- door berekenen van de autocovariantie.

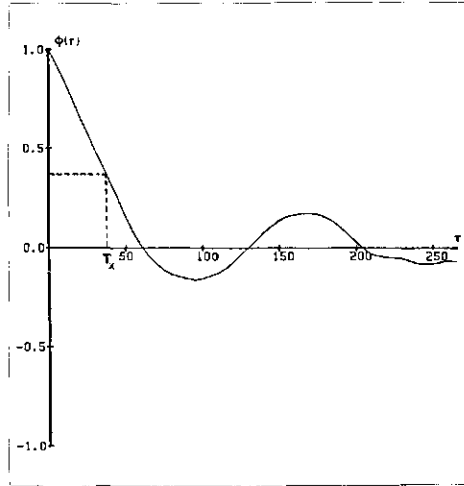
De resultaten van beide methoden zijn in elkaar om te zetten. Omdat de laatste methode voor wat betreft berekeningstechniek en inzichtelijkheid eenvoudiger is, wordt deze methode verder behandeld. Het begrip autocovariantie kan a.v. duidelijk worden gemaakt: De meetwaarden zoals weergegeven in afb. 2b zijn blijkbaar sterker gecorreleerd dan de meetwaarden van afb. 2a. Elke meting heeft iets met zijn buuren te maken. Dit wordt duidelijk zichtbaar als de meetwaarden uitgezet worden tegen hun buurman, die min of meer verder verwijderd is. In afb. 3 zijn de meetwaarden van afb. 2b uitgezet tegen de meetwaarden die 10 resp. 50 eenheden later gemeten zijn.



Afb. 3 - Waarnemingen X_{t+10} als functie van X_t . Waarnemingen X_{t+50} als functie van X_t .



Afb. 4a - Autocorrelogram van een reeks ongecorrleerde waarnemingen.



Afb. 4b - Autocorrelogram van een reeks gecorrleerde waarnemingen.

Dit kan gekwantificeerd worden door het vermenigvuldigen van elke meetwaarde met zijn 0, 1, 3 ... stappen verder gelegen buurman en het sommeren van deze produkten. Als de gemiddelde meetwaarde 0 gesteld wordt, blijkt dat in het geval van afb. 2a de kans groot is dat de som van deze produkten 0 is: de kans dat de vermenigvuldiging een positief of negatief resultaat heeft is even groot.

In formulevorm

$$\psi(\tau) = \frac{1}{N-t-1} \sum_{t=0}^{N-\tau} X_t \cdot X_{t+\tau}$$

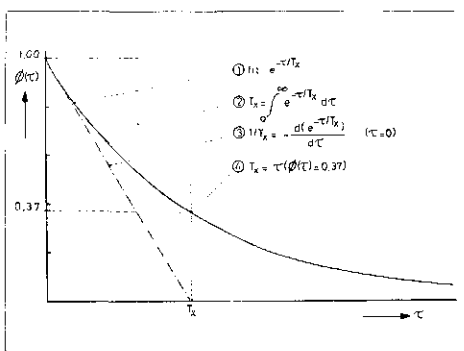
Uitzetten van $\psi(\tau)$, tegen τ , de afstand tussen de meetwaarden, levert afb. 4a en b. De autocovariantie kan genormeerd worden naar $\psi(\tau=0)=1$ door alle waarden van ψ te delen door $\psi(\tau=0)$. De nu verkregen functie [$\phi(\tau)$] die in afb. 4 gebruikt is, heet de autocorrelatiefunctie.

Het oppervlak van de autocorrelatiefunctie is een maat voor de snelheid van fluctueren van de meetwaarden.

Theoretisch zijn alle gecorrleerde proces-

sen te beschrijven met een of meer e machten als autocorrelatiefunctie. Een maat voor de snelheid van variëren, of de onderlinge gecorrleerdheid is de tijdconstante T_x die gevonden kan worden door de diverse methoden van afb. 5. Aangezien $\psi(\tau=0) = \sigma_x^2$ (de variantie van het object) levert de autocovariantiefunctie ons dus alle beschrijvings parameters van het object.

Afb. 5 - Enige manieren om T_x te bepalen uit een autocorrelogram.



De meter

In de kwaliteitsmeting van stoffen is dit vaak een chemische analyse, een combinatie van monsternamen, monstervoorbewerking, meting en dataverwerking. Deze analyse heeft vaak een beperkte capaciteit en beperkte snelheid. De beperkte capaciteit kan beschreven worden als een tijdconstante T_a , een maat voor de tijd die nodig is om de volle uitslag te bereiken, maar vaak, vooral bij niet continue metingen voldoet een praktische maat, de dode tijd D beter. (Dode tijd is de tijd die verloopt tussen het moment van monsternamen en het beschikbaar komen van het resultaat van de analyse).

D bepaalt bij een éénkanaalinstrument tevens de minimale tijd tussen twee analyses, A_{min} .

Een andere belangrijke parameter is de greepengte, de tijd G gedurende welke een monster opgezameld wordt alvorens gemengd te worden en als monster of deelmonster gebruikt te worden.

Tenslotte is een belangrijk kenmerk de fout σ_a die toegevoegd wordt aan de meting.

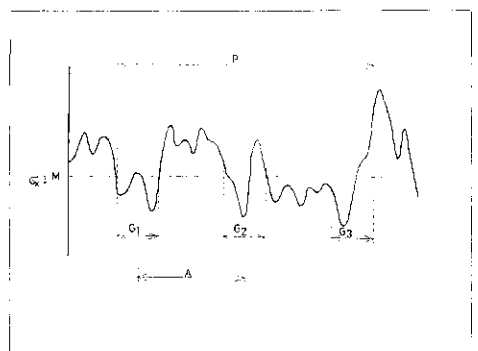
De relaties

Beschrijven

Als de partij (een eindig deel van een proces, d.i. een volgens statistische regels verlopende kwaliteit) ter lengte P beschreven moet worden, dan zal dat als regel gebeuren door een aantal monsters ter grootte G te nemen, deze al of niet samen te voegen tot een totaalmonster en te analyseren. Als niet de hele partij bemonsterd wordt zal — afhankelijk van de mate van autocorrelatie — de samenstelling van het totaalmonster (meer of minder) af kunnen wijken van de samenstelling van de partij (afb. 6).

De afstand tussen de middens van de grepen wordt gegeven door $A = P/n$. De afwijking van het totaalmonster ten opzichte van de werkelijke waarde van het gemiddelde van de partij kan beschreven worden met een variantie, σ_{est}^2 . Het blijkt,

Afb. 6 - Partijgrootte, greepengte en afstand tussen grepen.



$$\sigma_{est}^2 = 2\sigma_x^2 \left[\frac{1}{ng^2} (g-1 + e^{-g} + (e^{-g} + e^g - 2) \left\{ \frac{e^{-a}}{1-e^{-a}} - \frac{e^{-a}(1-e^{-p})}{n(1-e^{-a})^2} \right\}) \right. \\ \left. + \frac{1}{p^2} (p-1 + e^{-p}) - \frac{1}{npg} (2ng + (1-e^{-p})) \left\{ \frac{e^{-g}-1}{1-e^{-a}} - \frac{e^g-1}{1-e^a} \right\} \right]$$

zoals afgeleid door Müskens¹, dat deze variantie gegeven wordt door de volgende formule, waarin P, G en A gedeeld zijn door T_x en weergegeven zijn als p, g en a. (Zie bovenstaande formule.)

T_x = tijdconstante v.h. proces.

g = G/T_x.

p = P/T_x.

a = A/T_x.

σ_x² = variantie binnen partij.

G = greep lengte.

P = partij lengte.

A = afstand tussen middens grepen.

In afb. 7 is dit verband grafisch weergegeven.

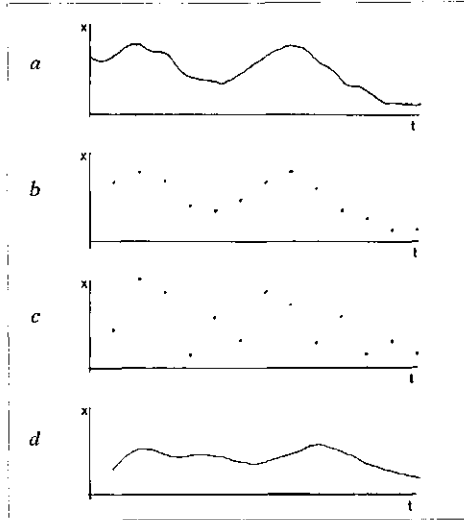
Uiteraard wordt het uiteindelijk kennen van de partij ook nog bepaald door

σ_a² via σ_a² = σ_{est}² + σ_a²/n.

Een andere situatie treedt op als de samenstelling niet globaal beschreven moet worden, maar in detail, d.w.z. het object moet gereconstrueerd worden uit de metingen (afb. 8).

De variaties van de kwaliteit in de partij of het proces (a) zijn weliswaar reëel, maar niet kenbaar. Alles wat men over de partij te weten kan komen is behept met een meetfout, de bemonstering kan discontinu zijn, (b) de meting kan een tijdvertraging

¹ P. J. W. H. Müskens, G. Kateman. Anal. Chim. Acta, Comp. and Opt. in press.



Afb. 8 - a. Proces. b. Bemonsteren. c. Meten. d. Reconstrueren.

hebben ondergaan etc. Alles wat bekend is, is een reeks getallen, resultaat van metingen (c).

De bedoeling is nu om uit deze reeks getallen de partij zo goed mogelijk te reconstrueren (d).

Een meetresultaat is een mogelijke waarde van de partij op het meetpunt. Een mogelijkheid om deze schatting van de kwaliteit op punt t te verbeteren is het gebruik maken van de informatie die uit het ver-

leden bekend is: de autocorrelatie van de metingen kan meegeenomen worden.

Dit levert een zgn. best geschatte waarde op die gegeven wordt door:

$$\hat{X}_t = (1 - k_t) \alpha \hat{X}_{t-1} + k_t w_t$$

$$\bar{X}_t = \alpha \hat{X}_{t-1}$$

$$k_t = \frac{\sigma_{x_t}^2}{\sigma_{x_t}^2 + \sigma_{x_{t-1}}^2}$$

$$\sigma_{x_t}^2 = \alpha^2 k_t \sigma_{x_{t-1}}^2 + (1 - \alpha^2) \sigma_{x_t}^2$$

$$\alpha = e^{-1/T_x}$$

$$\hat{X}_t = \text{opt. gereconstrueerde } X$$

\bar{x} = voorspelling van x

w = meetwaarde van x

T_x = tijdconstante

σ_x² = variante meter

Zowel \hat{X}_t als k_t worden dus voortdurend bijgesteld, waardoor elke volgende reconstructie beter wordt, d.w.z. meer informatie meekrijgt, dan de vorige. Voor partijen met eindige lengte betekent dit, dat een

waarde van k_t en \hat{X}_{t-1} geschat moet worden uit vorige partijen of dat iteratief gewerkt wordt.

Ook hier blijken dus zowel de eigenschappen van het object (T_x) als van de meter (σ_x) van belang te zijn.

Bewaken

Een stapje verder op de ingeslagen weg is uit de meetgegevens conclusies te gaan trekken over de toekomst, bijv. om te kunnen bewaken.

In principe gaat dit op dezelfde manier, uit de bekende gegevens wordt een optimale schatting gemaakt van de volgende, nog niet verrichte, meting.

Het verschil met de vorige situatie is dus dat deze schatting niet gecorrigeerd kan worden met de meting zelf.

Dit resulteert in:

$$\bar{X}_{t+v} = \alpha^v \hat{X}_t = \alpha^{v+1} (1 - K_t) \hat{X}_{t-1} + K_t w_t$$

$$\sigma_{x_{t+v}}^2 = \alpha^{2v} K_t \sigma_x^2 + (1 - \alpha^{2v}) \sigma_x^2$$

$$= \sigma_x^2 (\alpha^{2v} (K_t - 1) + 1)$$

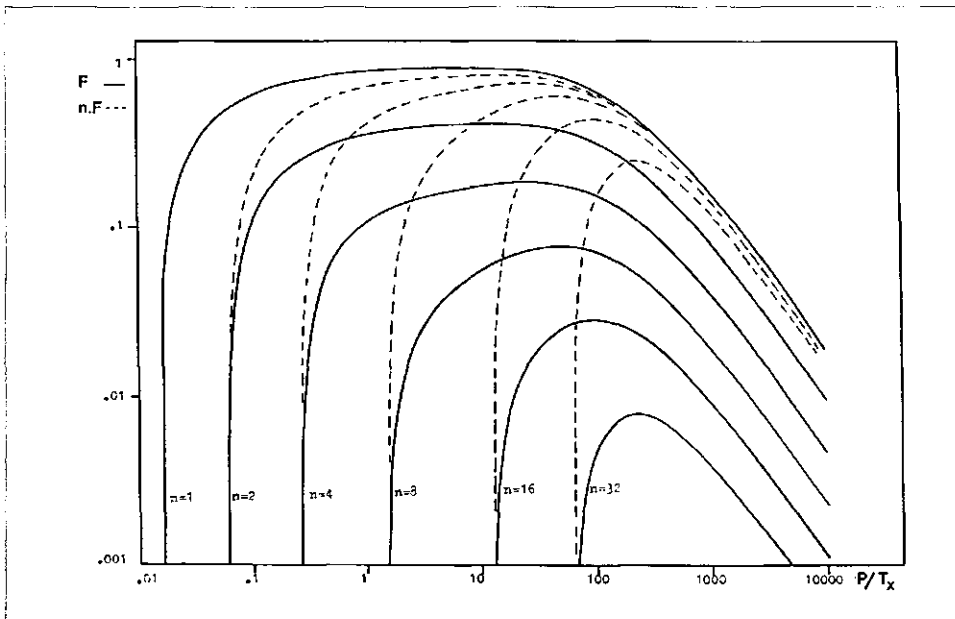
\bar{X}_{t+v} = voorspelling van X over een periode v

\hat{X}_t = laatste optimaal gereconstrueerde X

w_t = laatste meetwaarde

Een punt van overweging hierbij is nog dat

Afb. 7 - Verband tussen partijgrootte en greep lengte voor σ_{est} = 0.1.



de dode tijd in de analyse ons eigenlijk al dwingt om een schatting van \bar{X}_t te maken omdat het analyseresultaat nog niet binnen is.

Met vorengenoemde formules is het nu mogelijk vanuit tijdstip t een schatting te maken van toekomstige waarden van X_{t+v} met de bijbehorende spreiding. Als aan die spreiding een betrouwbaarheidsinterval gekoppeld wordt kan beslist worden of met voldoende zekerheid een uitspraak gedaan kan worden over het al dan niet waarschijnlijk zijn van het overschrijden van de bewakingsdrempel (afb. 9).

Regelen

Gebruik makend van eerder genoemde voorspellingen en middelingstechnieken kan nu een aantal betrekkingen afgeleid worden die een inzicht geven in de kans dat een regeling van een fluctuerende waarde succes zal hebben. Een maat voor dit succes is

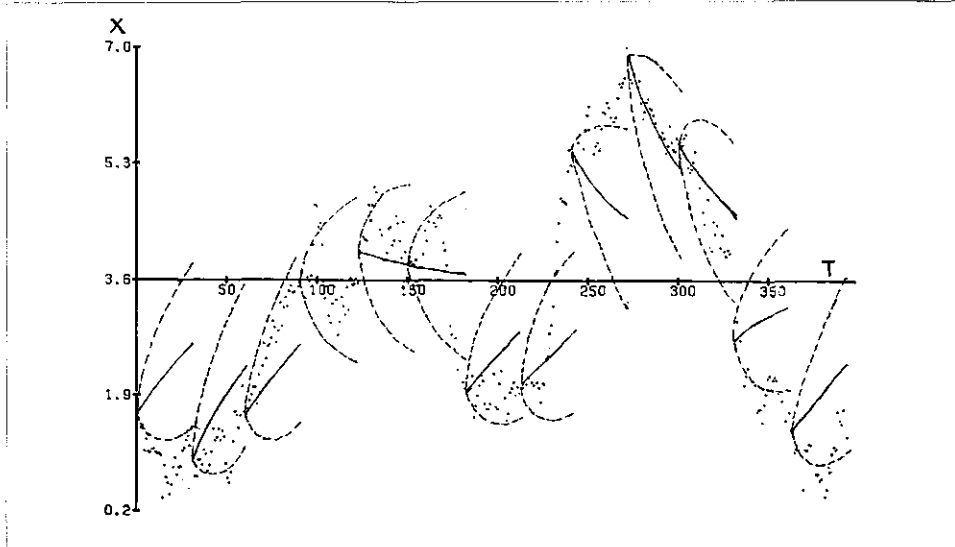
$$m^2 = \frac{\sigma_{onger}^2 - \sigma_{ger}^2}{\sigma_{onger}^2}$$

Het bereikbare succes van regelen wordt bepaald door de autocorrelatie: het gecorreleerde deel kan min of meer voorspeld worden, het niet gecorreleerde deel niet.

TABEL I.

Doel	Kriterium	M Object					Meter		
		T _x	σ _x	P	W _t	σ _a	G	A	D
Beschrijven globaal	variabele	x	x	x	x	x	x	x	
Beschrijven in detail	σ _{est.}	x	x		x	x		x	
Bewaken (C = bew. grens)	X _t	x	x		x	x		x	x
Regelen	C - X _{t+v}	x	x			x	x	x	x

Afb. 9 - Voorspellingen met betrouwbaarheidsinterval.



Bij een voorspelruimte V zal de meetbaarheid beïnvloed worden volgens $\alpha^V = e^{-V/T_x}$. V bestaat o.a. uit de aftasttijd A tussen twee monsters. Gemiddeld zal over 1/2 A voorspeld moeten worden. De dode tijd D tussen monsternamen en analyse speelt mee, evenals de afvlakkende invloed van de greeplengte G, die voor ongeveer 1/3 G meetelt in V.

D.w.z. $V = D + 1/2 A + 1/3 G$

of $m_v = e^{-(d+1/2a+1/3g)}$.

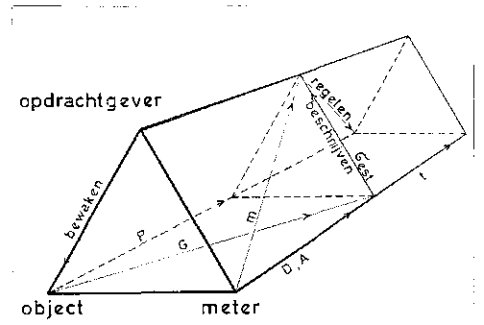
Een correctie voor de metereigenschappen levert een factor m_N op.

$$m_N = 1 - \frac{\sigma_a}{\sigma_x} \sqrt{\frac{A}{T_x}} = 1 - \frac{\sigma_a}{\sigma_x} \sqrt{a}$$

zodat

$$m = m_v m_N = e^{-(d+1/2a+1/3g)} \left(1 - \frac{\sigma_a}{\sigma_x} \sqrt{a}\right)$$

In tabel I zijn de diverse parameters voor de verschillende doelstellingen samengevat, in afb. 10 is het fragiele bouwwerk getekend dat de relaties tussen de diverse doelen aangeeft. Het is duidelijk, dat weglaten van één van de verbindingen, het bouwwerk ineem doet storten. M.a.w. om met succes kwaliteitsmetingen te kunnen (laten) verrichten is een goede kennis noodzakelijk van de componenten object, meter



Afb. 10 - Componenten en relaties in de kwaliteitsmeting.

en opdrachtgever en hun onderlinge relaties.

Aanbevolen literatuur

Bartlett, M. S. *An introduction to stochastic processes*. Univ. Press. Cambridge 1966.
 Box, G. E. P., Jenkins, G. M., *Time series analysis*. Holden Day, San Francisco 1970.
 Grinten, P. M. E. M. v. d., Lenoir, J. M., *Statistische procesbeheersing*. Prisma Technica 50, Het Spectrum Utrecht 1973.

Geen nieuwe ontwikkeling rond drinkwaterfluoridering

Gedwongen drinkwaterfluoridering is een dermate controversiële zaak dat deze alleen na zeer rijp beraad — en in een vorm, die minderheden recht doet — kan worden gerealiseerd. Zo'n vorm ken ik nog niet, maar misschien is het een goede gedachte, eens een brief aan de Kamer te zenden inzake de verschillende kwesties, die de tandheelkunde betreffen, waarbij ook deze zaak wordt betrokken. Aldus de staatssecretaris van Volksgezondheid mevr. Veder-Smit op 23 februari jl. in de Tweede Kamer in antwoord op desbetreffende opmerkingen van het Kamerlid voor de P.v.d.A. de heer Drenth. En zij besloot: Het wonderlijke is, dat het succes van de fluoridering berust op haar dwangmatige karakter en dat daartegen nu juist de principiële bezwaren bestaan.

GS van Drenthe en Gelderland houden afval in het oog

In Drenthe en Gelderland is een verordening van kracht geworden die een ontheffing vereist van GS om industrieel afval van een bedrijfsterrein te verwijderen of in de provincie in te voeren. Een dergelijke regeling bestond al in Noord- en Zuid-Holland en Utrecht.