Beiträge betreffend Einsatz von Kleinrechengeräten zur Datenauswertung auf dem Wassergütesektor

	Seite
Einleitung	158-159
1. Mitteilung: W. RODINGER Auswertung biologischer Meßdaten mit dem technisch-wissenschaftlichen Rechengerät "DIEHL-ALPHATRONIC"	160-169
2. Mitteilung: L.J. OTTENDORFER Berechnung von Ausgleichskurven höherer Ordnung mit dem Taschenrechner "TI-59 Programmable"	170-186
3. Mitteilung: M. FRIEDRICH und L.J.OTTENDORFER Programm zur Berechnung des Massenabsorptionskoeffizienten der β^--Strahlung mit TI-59	187-193
4. Mitteilung: M. FRIEDRICH und W. KRONER Meßwertverarbeitung in der radiologischen Überwachung von Oberflächengewässern in Österreich	194-205

Einleitung

Schon vor Jahren ergab sich an der Bundesanstalt für Wassergüte die Notwendigkeit, für die Auswertung und die mathematisch-statistische Behandlung von Untersuchungsergebnissen Kleinrechengeräte einzusetzen. Einige dieser Geräte wurden für die speziellen Aufgaben einzelner Fachabteilungen, wie Chemie oder Radiologie, angeschafft. Für etwas allgemeinere, aber auch komplexere Aufgaben steht allen Fachabteilungen das technisch-wissenschaftliche Rechengerät "DIEHL-ALPHATRONIC" zur Verfügung. Dieses Gerät ist mit einer elektronischen Schreibmaschine gekoppelt, die als Ein- und Ausgabeeinheit bzw. als Drucker verwendet wird. Ferner sind eine Lochstreifen- und eine Magnetbandleseeinheit angeschlossen, die neben zahlreichen anderen Aufgaben auch für die Auswertung biologischer und radiologischer Meßergebnisse dienen (siehe 1. Mitteilung, RODINGER, Seite 160-169; 4. Mitteilung FRIEDRICH u. KRONER, Seite 194-205).

Mit Hilfe der Magnetbandlesestation werden auch die in den drei derzeit im Einsatz stehenden Wassergütemeßstationen über einen Zeitraum von einem Monat gespeicherten Meßdaten übertragen und ausgewertet, worüberin Band 27 dieser Schriftenreihe berichtet wird (KREITNER, 1983).

Im Hinblick auf die außerordentliche Leistungssteigerung der Kleincomputer, die in letzter Zeit zu verzeichnen ist, entsprechen die in den nachfolgenden Mitteilungen beschriebenen Anwendungen der in der Bundesanstalt für Wassergüte derzeit verfügbaren Kleinrechner nicht mehr ganz den neuesten Möglichkeiten. Die Aufgaben, zu deren Bewältigung diese Geräte angeschafft wurden, sind jedoch im wesentlichen dieselben geblieben.

Daß der Einsatz von Taschenrechnern der höchsten Leistungsklasse - zu denen auch der in zwei der nachfolgenden Arbeiten verwendete programmierbare Taschenrechner TI-59 zählt - (siehe 2. Mitteilung, OTTENDORFER, Seite 170-186; 3. Mitteilung, FRIEDRICH u. OTTENDORFER, Seite 187-193) nach wie vor aktuell und zweckmäßig ist, beweist eine erhebliche Anzahl von Veröffentlichungen aus allerletzter Zeit. Der Vorteil dieser handlichen Geräte ist wohl darin zu sehen, daß sie wegen ihrer Handlichkeit und der Möglichkeit des Einsatzes von zahlreichen auf Magnetkarten gespeicherten Rechenprogrammen auch ortsunabhängig verwendet werden können.

Die nachfolgenden vier Mitteilungen befassen sich teils mit speziellen Auswerteverfahren, teils mit allgemeinen Rechengängen, die bei naturwissenschaftlichen Aufgabenstellungen Anwendung finden können; sie sollen als Beispiel für die vielfältigen Einsatzmöglichkeiten von Geräten dieser Leistungsklasse betrachtet werden.

1.Mitteilung: W.RODINGER

Auswertung biologischer Meßdaten mit dem technisch-wissenschaftlichen Rechengerät "DIEHL-ALPHATRONIC".

Das technisch-wissenschaftliche Rechengerät DIEHL-ALPHATRONIC der Bundesanstalt für Wassergüte stellt in seinem Aufbau und seiner Wirkungsweise die Kombination eines Tischrechners mit einem Kleincomputer dar. Typisch für einen Tischrechner ist vor allem der Umstand, daß keine der üblichen Programmiersprachen wie BASIC, FORTRAN, ASSEMBLER, usw. zum Zwecke der Befehlseingabe benötigt wird. Die Programmabläufe werden durch geräteeigene Programmtasten gesteuert. Die Rechenkapazität der Zentraleinheit, die Möglichkeit Peripheriegeräte anschließen zu können, die Verarbeitung wie auch die interne und externe Speicherung von alphanumerischen Daten und Programmen rechtfertigen aber auch die Bezeichnung "Kleincomputer".

Neben den für Rechengeräte heutzutage selbstverständlichen Anwendungsmöglichkeiten für diverse Rechnungsarten und -operationen beinhaltet die Zentraleinheit der DIEHL-ALPHATRONIC außerdem Platz für die Speicherung von 416o Befehlen (416 interne Register für Programme oder Daten). Programmhilfen wie indirekte oder induzierte Adressierung, symbolische Adressen, Einbau von Unterprogrammen beliebiger Tiefe, Schleifenbildung und logische Verzweigungen können ebenfalls in Anspruch genommen werden. Mit Hilfe eines ROM-Einschubes sind statistische Funktionen und Analysen, auf die später noch eingegangen werden soll, mit der Zentraleinheit allein verarbeitbar.

Ein internes LSI-Interface ermöglicht via Stecker den Anschluß von vier Peripheriegeräten gleichzeitig. Magnetbandstation, Lochstreifenleser und eine elektronische Schreibmaschine stehen für die Datenein- und -ausgabe wie auch für die Speicherung zur Verfügung.

Im Rahmen der Abteilung Biologie findet das technisch-wissenschaftliche Rechengerät DIEHL-ALPHATRONIC vielfache Verwendung. Allein mit der Zentraleinheit werden dieverse kleinere Rechen-

programme binnen kurzem erledigt.

Mit Hilfe des verdrahteten S t a t i s t i k - ROMs werden oft Verteilungen von Werten auf ihre Gesetzmäßigkeit hin mit R e g r e s s i o n s k u v e n h ö h e r e r O r d n u n g überprüft. Als Beispiel dafür kann die Abhängigkeit der Phosphorkonzentration von der Wasserführung im Einzugsgebiet des Zeller Sees angeführt werden. Anhand von Kurven 3. bzw. 4. Ordnung konnte unter Heranziehung halbmonatlicher Meßdaten eine tägliche Phosphorfracht zurückgerechnet werden. Zusammengefaßt fanden diese Angaben als Jahresbilanz ihren Niederschlag in der Literatur (K.SLANINA, 1981).

Zur Ermittlung von Koeffizienten m e h r d i m e n s i o n a l e r l i n e a r e r R e g r e s s i o n e n wurden unter anderem auch Werte in den Rechner eingegeben, die für die Produktion pflanzlichen Materials lebensnotwendig sind. Chlorophyll, die Resultierende der Aufbaufaktoren, wurde dabei als Bezugspunkt für die Berechnungen herangezogen, deren Ergebnisse veröffentlicht wurden (W.RODINGER, 1982).

Ein weiteres wichtiges Detail des Statistik - ROMs bildet das Programm für die B e r e c h n u n g v o n M i t t e l w e r t e n, S t a n d a r d a b w e i c h u n g e n u n d K o r r e l a t i o n s k o e f f i z i e n t e n m e h r d i m e n s i o n a l e r D a t e n. Für die Darstellung von Clustern müssen zunächst alle gewählten Einheiten mit ihren Kennparametern untereinander verglichen werden. Als Maßzahlen dafür können besonders im Bereich der Biologie Assoziationskoeffizienten, Abstandskoeffizienten und vor allem Korrelationskoeffizienten verwendet werden (W.NÖBAUER, W.TIMISCHL, 1979). Mit Hilfe der DIEHL-ALPHATRONIC kann mit einmaliger Eingabe der einzelnen Daten sehr leicht der Vergleich aller Einheiten untereinander bewerkstelligt werden. Die weitere Berechnung des Clusters und dessen graphische Darstellung erfolgt vorerst noch auf händischem Weg.

Ebenso ist es mit diesem ROM-Programm leicht möglich, zeitverschobene Wirkungskreise zu erkennen.

Beispielsweise beeinflußt eine Wasserstandsschwankung der Donau den Gesamtkeimgehalt der Neuen Donau (Entlastungsgerinne); die quantitativen Änderungen treten jedoch nicht sofort auf, sondern erst nach drei Tagen. Dies wurde herausgefunden nachdem den biologischen Parametern Donaupegelstände zum Untersuchungszeitpunkt, die des vorhergehenden Tages, die des vorvorigen Tages usw. bis zu dem 12 Tage vor Probenahme aufgezeichneten Pegelstand in einer Korrelationsanalyse gegenübergestellt worden waren. Der höchste Korrelationskoeffizient wies dann auf das Ausmaß der zeitlichen Verschiebung hin (G.JAKSCH,W.RODINGER 1982)

Die an die Zentraleinheit angeschlossene Magnetbandstation ermöglicht es,auch längere Programme stets griffbereit zu haben. Auf ein zweites Band kopiert und auch aufgelistet liegen die Arbeitsabläufe der DIEHL-ALPHATRONIC dokumentiert vor.

Bei quantitativen Aufnahmen ist es vor Weiterbehandlung des Datenmaterials oft wichtig,die Art der statistischen Verteilung zu kennen. Anhand programmierter Schemata kann nun sehr leicht mit Hilfe des Chi - Quadrat - Tests geprüft werden, ob die vorliegenden Angaben diskret (Poisson Verteilung), normal (Gauß'sche Verteilung) geklumpt(Negative Binominal - Verteilung) oder regelmäßig (Positive Binominal - Verteilung) verteilt sind. Bei der Auswertung von Datenmaterial, welches aus gleichartigen Proben stammt oder welches in Form eines Ringtests erarbeitet wurde, kann seine Homogenität unter Anwendung des Ausreißertests nach NALIMOV überprüft werden. Da mit dem eigentlichen Rechenprogramm auch gleich Werte der r-Tabelle (G.GOTTSCHALK, R.KAISER, 1972) gespeichert wurden (für $n \leq 2o$) erfolgt die Gegenüberstellung und Entscheidung des Niveaus der Ausreißersignifikanz gleich in einem Arbeitsvorgang.

Das Ergebnis wird am Schreiberstreifen in der Form präsentiert, daß an erster Stelle der errechnete r- Wert ausgedruckt wird und die nachfolgenden drei Ausdrucke mittels ihres Vorzeichenwertes kennzeichnen, welche Signifikanzniveaus unterschritten werden; es wird damit kundgetan, ob der Ausreißer keiner, wahrscheinlich, signifikant oder hoch signifikant ist.

Beim Vergleich zweier Versuchsreihen kann mit dem t- Test (S i g n i f i k a n z d e s U n t e r s c h i e d e s z w i s c h e n M i t t e l w e r t e n) die Gleichartigkeit bzw. die Verschiedenheit auf statistischer Basis festgehalten werden. Liegen Angaben über Versuchsreihen beliebiger Gruppenanzahl und Reihenlänge vor, so wird mittels V a r i a n z - a n a l y s e beurteilt, ob die Verschiedenheit zwischen den Gruppen größer ist als innerhalb derselben, es sich also um verschiedenartige Testergebnisse handelt oder nicht.

Abgesehen von den oberhalb erwähnten statistischen Prüfverfahren besteht mittels Programmspeicherung auf Magnetband auch die Möglichkeit Kenndaten der G e w ä s s e r g ü t e direkt zu berechnen.

Mit Hilfe einer vorbereiteten Matrix können aus Angaben der saprobiellen Valenz und der Häufigkeit rasch der Saprobienindex, die Prozentangaben der relativen Güte und relativen Belastung sowie die Summenwerte der Bereiche aller vier Gütestufen ermittelt werden. Mit diesen Ergebnissen kann dann die Güte von Fließgewässern beschrieben werden.

Der T r o p h i e g r a d v o n S e e n des Mittellandes kann nach der Methode von SCHRÖDER leicht errechnet werden, wenn Mittelwerte von Stickstoff - und Phosphorkonzentrationen, Temperaturwerte, Abweichung von der durchschnittlichen Sonnscheindauer sowie Angaben über Ausdehnung der Seeoberfläche und der mittleren Seetiefe via Tastatur der DIEHL-ALPHATRONIC eingegeben werden.

Meßergebnisse des Chlorophyllaufschlusses werden mittels Programm auf C h l o r o p h y l l a, b und c Konzentrationen gemäß der Methode des OECD - Alpine Projects 1974 und auch auf Gesamtchlorophyll a und Phaeophytingehalte nach der Methode von GOLTERMAN (1971) umgerechnet und auf Schreiberstreifen dargestellt.

Die Prüfung von Chemikalien und Abwässern mittels Tier- und Pflanzentests gehört genau so wie die Qualitätsbestimmung von Gewässern zum Aufgabenbereich der Bundesanstalt für Wassergüte. Eine Methode der rechnerischen Versuchsauswertung konnte mit Hilfe der Zentraleinheit und der Magnetbandstation neu entwickelt werden und soll nun im folgenden genauer beschrieben werden:

Bei der Durchführung von Toxizitätstests wird die Menge der reagierenden Organismen pro Versuchseinheit notiert und in Prozentwerten dargestellt. Die Bestimmung des LC_{50}- bzw. EC_{50}- Wertes (letal concentration, effective concentration) ist internationales Methodengut und ein Maß zur Charakterisierung der Konzentration der untersuchten Substanz, bei welcher 50 % der Testorganismen letal bzw. auf eine andere, vorher definierte Weise reagieren.

Die Ermittlung des LC_{50} bzw. EC_{50}- Wertes erfolgt nach Versuchsauswertung meist auf graphischem Weg durch Einzeichnen der zwischen 10 % und 90 % gelegenen Angaben im Wahrscheinlichkeitspapier, optischem Anpassen einer Geraden an die markierten Punkte und Ablesen der gesuchten Konzentration am Schnittpunkt der Geraden mit dem 50 %-Wert.

Da die Genauigkeit dieses Verfahrens oft vom subjektiven Empfinden des Bearbeiters abhängig ist (Anpassen der Geraden) wurde versucht, mittels einer Näherungsrechnung rascher und unter geringerem Zeitaufwand zu einem vom Auswerter unabhängigen

Ergebnis zu kommen, bei welchem außerdem die 95 % Vertrauensgrenzen gleich mit dargestellt werden können.

Wie in der Abbildung 1 (aus WEBER, E., 1957) gezeigt, kann die Summenprozentkurve der Normalverteilung durch Transformation der Ordinatenskala in eine Gerade überführt werden.

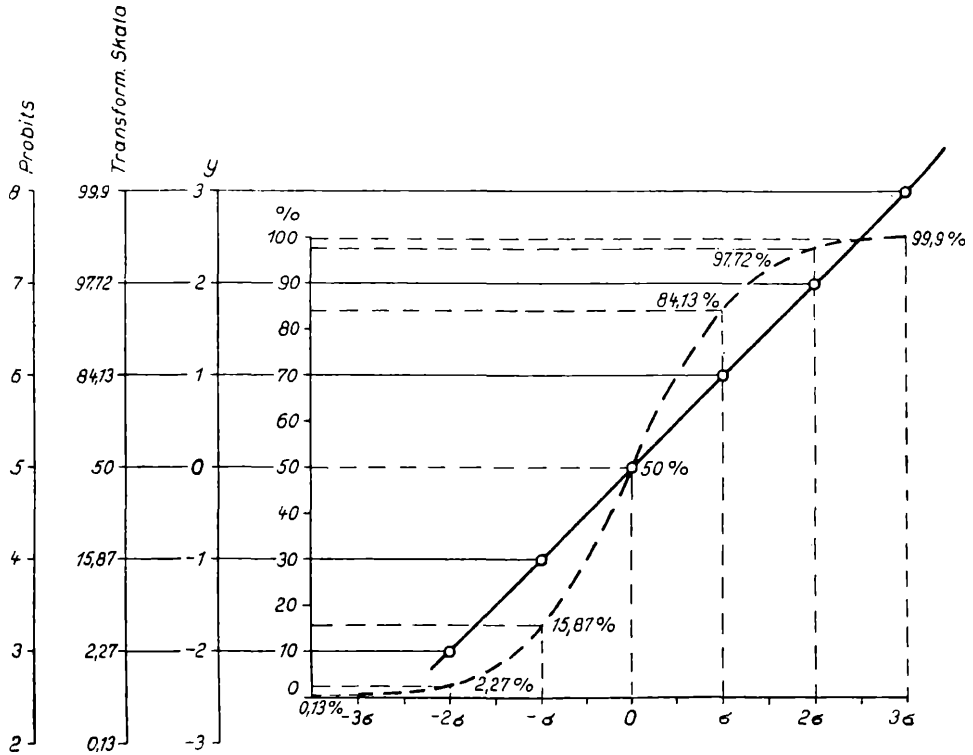
Neben der ursprünglichen linearen Prozentordinatenskala wird eine Senkrechte gezeichnet und der Nullpunkt bei 5o % angenommen. Die σ-Einteilung der Abszisse wird nun nach oben und unten hin aufgetragen; die Werte reichen von $+\infty$ bis $-\infty$ wie die σ-Werte selbst (y Skala). Neben die y-Achse wird noch eine Skala gezeichnet, auf der neben die Einheiten von σ die von der Summenprozentkurve abgelesenen Prozentsätze geschrieben werden; sie stellt die transformierte Skala der Prozentwerte dar. Dieselben σ-Einheiten bilden auch das Einteilungsschema der vierten Ordinate, der Probitskala. 5o % der transformierten Skala werden hier mit 5 bezeichnet, die oberhalb gelegenen σ-Einheiten mit 6,7 und 8, die unterhalb gelegenen σ-Einheiten mit 4,3 und 2 beziffert. Dies geschieht, um negative Werte, wie sie bei der y-Skala vorhanden sind, zu vermeiden.

Zur näherungsweisen rechnerischen Umformung der linearen Prozentwerte auf Probitwerte wurde zunächst einmal eine Regressionsgerade an die logarithmierten Werte der Summenprozentkurve angepaßt. Die Differenzen zwischen den Werten der Regressionsgeraden und logarithmierten Werten der Summenprozentkurve sind durch eine Kurve 3.Ordnung darstellbar, deren Koeffizienten als Steigung der Regressionsgeraden beschrieben werden.

Die Gleichung der Form

$$y=(e\ \exp(o,4615(\ln\%)^3-5,2o47(\ln\%)^2+2o,3933(\ln\%)-23,8577)).o,o27335+3,63325$$

ergibt näherungsweise errechnete Probitwerte, die im Bereich



Konstruktion der transformierten Ordinatenskala.

1o % bis 9o % den tabellarisch beschriebenen Probitwerten (WEBER,E., 1957) sehr ähnlich sind (Korrelationskoeffizient r = o,9998).

Bei der Berechnung des LC_{5o}- bzw. EC_{5o}- Wertes werden nun die so errechneten Probitwerte in der Ordinate den in der Abszisse eingetragenen logarithmierten Werten der Konzentration der einzelnen Versuchseinheiten gegenübergestellt. Der nächste Schritt stellt die Berechnung einer Regressionsgeraden dar. Jener Punkt auf der Regressionsgeraden,der dem Probitwert 5 auf der Ordinatenskala zugeordnet ist, entspricht nun auf der Abszisse dem Konzentrationswert, der die LC_{5o} bzw. die EC_{5o} kennzeichnet. Die Probitwerte 4 bzw. 6 beschreiben via Regressionsgerade auf die Abszisse übertragen die einfache Standardabweichung (s). Für die Berechnung der Vertrauensgrenzen nach der Formel $LC_{5o} \pm s.t / \sqrt{n}$ wurden gemeinsam mit dem Rechenprogramm die Werte der t-Verteilung für 95 % Wahrscheinlichkeit und für $n \leq 15$ auf dem Magnetband gespeichert. Entsprechend der Anzahl der eingegebenen Wertpaare (n)werden nun maschinell der entsprechende t-Wert abgerufen und die Vertrauensgrenzen berechnet. Obere und untere Vertrauensgrenze wie auch der LC_{5o} (EC_{5o}) - Wert werden nach Beendigung des Rechenvorganges auf dem Schreiberstreifen ausgedruckt dargestellt.
Beispielsweise wurden bei einem akuten Kurzzeittoxizitätstest folgende letale Reaktionen bei Fischen beobachtet:

Aquarium 1 % tote Fische	Aquarium 2 % tote Fische	Konzentration der Substanz g/l
o	o	o,o
o	o	o,5
2o	2o	1
2o	4o	3
4o	6o	5
8o	6o	7
8o	8o	9
1oo	1oo	11

Nach Eingabe der Daten (Prozentwerte, Konzentration) in das oben erläuterte Programm werden die

- untere Vertrauensgrenze mit 0,0 g/l
- die obere Vertrauensgrenze mit 11 g/l und der
- LC_{50}-Wert mit 3,9 g/l auf dem Schreiberstreifen ausgewertet.

Zentraleinheit, Magnetbandstation und Schreibmaschine werden für die Aufzeichnung von partiellen Korrelationskoeffizienten benötigt.

Sehr oft sind nämlich mehr als zwei Veränderliche an dem Zustandekommen eines beobachteten Zusammenhanges beteiligt und man würde zu Fehlschlüssen kommen, wenn man nicht alle Größen in Rechnung setzte. Der Zusammenhang zwischen zwei Veränderlichen kann z.B. durch eine dritte oder weitere Variable gestört sein. Unter Ausschaltung einer bzw. zwei Größen kann unter Anwendung des gegenständlichen Programmes ein Vergleich von vier Variablen stattfinden, wobei alle möglichen Kombinationen via Schreibmaschine für die weitere Beurteilung ausgedruckt werden.

Literatur:

GOLTERMANN, H.L. (1971): Determination of chlorophyll and phaeophytin.- IBP Handbook No.8, Blackwell Scientific Publications, Oxford and Edinburgh.

JAKSCH, G., RODINGER, W. (1982): Güteuntersuchungen an fertiggestellten Teilstrecken der Neuen Donau - Auswirkungen des Durchganges der Hochwasserwelle im Spätsommer 1981.- Wasser und Abwasser, Bd.25.

KAISER, R., GOTTSCHALK, G. (1972): Elementare Tests zur Beurteilung von Meßdaten B.I.- Hochschultaschenbücher Bd.774.

NÖBAUER, W., TIMISCHL, W. (1979): Mathematische Modelle in der Biologie.- Fried.Vieweg & Sohn, Braunschweig/Wiesbaden.

RODINGER, W. (1982): Ein Versuch der Darstellung von Beziehungen zwischen Planktonbiomasse (Chlorophyll a) und pflanzlichen Aufbaufaktoren in der österreichischen Donau.- ÖWW, Jg.34, H.7/8, 171-173.

SCHRÖDER, R. (1974): Die Bestimmung von Chlorophyll a, b u.c im Routineverfahren.- OECD Alpine Project.

SLANINA, K. (1981): Zeller See - Limnologische Entwicklung - Ergebnisse der Basisuntersuchung 1979.- Wasserwirtschaftskataster, Teil I: Grundlagen der Wasserwirtschaft, Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Wien.

WEBER, E. (1957): Grundriß der biologischen Statistik.- VEB Gustav Fischer Verlag, Jena.

Anschrift des Verfassers: OKoär Dr.Wolfgang RODINGER, Bundesanstalt für Wassergüte, Schiffmühlenstraße 12o, Postfach 52, A-1223 W i e n.

2. Mitteilung: L. J. OTTENDORFER

Berechnung von Ausgleichskurven höherer Ordnung mit dem Taschenrechner "TI-59 Programmable"

Einleitung:

Bei der Auswertung wassergütewirtschaftlicher Meß- und Untersuchungsergebnisse ergeben sich zwischen den ermittelten Meßgrößen Zusammenhänge verschiedenster Art, für die eine möglichst gut angepaßte Ausgleichsfunktion ermittelt werden muß. Sofern es nicht möglich ist, diese Funktion unmittelbar oder nach entsprechender Umformung der Parameter als Gerade darzustellen, wird man versuchen als optimale Ausgleichsfunktion ein Polynom zu berechnen. In einfachen Fällen entspricht bereits eine Funktion zweiter Ordnung (Parabel oder Hyperbel). Wenn kompliziertere Zusammenhänge interpretiert werden müssen, ergibt sich die Notwendigkeit, aus den gegebenen Wertepaaren Polynome der dritten und allenfalls höherer Ordnungen heranzuziehen.

Selbstverständlich wird man nach Möglichkeit leistungsfähige Rechenanlagen zur Lösung solcher in mathematischer Hinsicht manchmal recht komplizierter Aufgaben heranziehen (WAGNER, 1980).

Es ist aber, wie eine Reihe von Publikationen jüngeren Datums zeigen (z. B. SCHÄRF, 1980; NOACK, 1980), durchaus möglich, mit einem der handelsüblichen technisch-wissenschaftlichen Taschenrechner Ausgleichskurven höherer Ordnung mit einem sehr geringen zeitlichen Gesamtaufwand zu berechnen.
Die Entwicklung der dafür notwendigen Programme erfordert eine sehr eingehende Kenntnis der Leistungsfähigkeit eines solchen Rechners, über die nicht jeder Besitzer eines solchen Gerätes verfügen kann.

Die in dieser Arbeit vorgestellte Aufgabe lautet:

1) Auffinden und Berechnen einer Ausgleichskurve.

2) Beurteilung der Richtigkeit der getroffenen Annahme mit objektiven statistischen Prüfgrößen.

3) Eventuelle Korrektur und Optimierung der zuerst getroffenen Annahme durch statistischen Vergleich der möglichen Lösungsvorschläge.
(Berechnung des Korrelationskoeffizienten, der Prüfgröße TAU und der statistischen Sicherheit S).

Es soll keineswegs versucht werden, den für diese Arbeit verwendeten Taschenrechner TI-59 oder ein ähnliches Gerät derselben Größenordnung (wie z.B. HEWLETT PACKARD HP 97) als Ersatz für andere, wesentlich leistungsfähigere Rechenanlagen in Betracht zu ziehen.

Der Vorteil liegt nach Ansicht des Verfassers hauptsächlich darin, daß ein derartiges Gerät jederzeit, auch bei Untersuchungen an Ort und Stelle,verwendet werden kann und somit wesentliche Aufschlüsse in kürzester Zeit zu liefern vermag, die oft für den weiteren Gang der laufenden Untersuchungen von erheblicher Bedeutung sein können. Außerdem können vorbereitende Rechnungen oder Zwischenrechnungen parallel zu einer allenfalls vorhandenen größeren Rechenanlage durchgeführt werden, ohne deren Arbeitsfluß zu stören.

Voraussetzung für den erfolgreichen Einsatz eines Taschenrechners ist das Vorhandensein von Programmen, die auf den speziellen Verwendungszweck abgestimmt sind. Obwohl sich sowohl im Bedienungshandbuch als auch in den Programmanleitungen zu den mitgelieferten bzw. zusätzlich lieferbaren Software-Programmbibliotheken zahlreiche Programme anbieten, zeigt sich immer, daß jede spezielle Aufgabe ihr eigenes Programm erfordert. Da diese Programme auf kleinen Magnetkarten gespeichert werden können, lassen sich unschwer

einige Dutzend Programme übersichtlich geordnet bereit halten.

Als Ausgangspunkt der folgenden mathematischen Überlegungen diente eine Serie von Messungen bzw. von Bestimmungen des Zusammenhanges zwischen Phosphatkonzentration und Wasserführung von Zuflüssen des Zeller Sees (SLANINA, 1981).

Mathematische Voraussetzungen für die Erstellung eines Programmes zur Berechnung von Polynomen bis zur fünften Ordnung.

Die allgemeine Vorgangsweise ist folgende:

Aus den Meßergebnissen ergeben sich n Wertepaare $(x_i/Y_{i(gef.)})$, die in ein rechtwinkeliges Koordinatensystem eingezeichnet werden. Unter der Voraussetzung der richtigen Wahl der Maßstäbe ergibt die resultierende "Punktwolke" bereits einen ungefähren Eindruck vom Verlauf der Ausgleichskurve, die zunächst versuchsweise freihändig eingetragen werden kann. Aus der mehr oder weniger deutlich ausgeprägten Lage eventueller Maxima, Minima und Wendepunkte und der Richtung der beiden Kurvenäste an den Grenzen des gewählten Meßintervalls ergibt sich bereits ein deutlicher Hinweis für die Auswahl eines geeignet erscheinenden Polynoms.

Für die Berechnung eines Polynoms N-ten Grades müssen aus den gegebenen n Wertepaaren $(x_i; y_i)$ die Regressionskoeffizienten

$$a_o, a_1, \qquad a_N$$

für die folgende Funktion ermittelt werden:

$$y = f(x) = a_i.x^i = a_o + a_1.x + a_2.x^2 \qquad a_N.x^N \quad \text{-Gl.1-}$$

Im allgemeinen bedient man sich zu diesem Zweck der Methode der kleinsten Fehlerquadrate nach GAUSS, wobei die nachstehende Minimumsbedingung erfüllt sein muß:

$$\Sigma[y_i - f(x)]^2 = \Sigma[y_i - a_o - a_1x - a_2x^2 - a_Nx^N]^2 = \min. \quad \text{-Gl.2-}$$

Die Minimumsbedingung ist erfüllt, wenn die 1.Ableitung des obigen Ausdrucks gleich Null ist. Man hat daher den obigen Ausdruck in bekannter Weise nach den Konstanten a_o bis a_N partiell zu differenzieren, wobei man für ein Polynom N-ten Grades N + 1 lineare Bestimmungsgleichungen erhält:

$$\begin{aligned}
a_o .n &+ a_1 \Sigma x^1 + a_2 \Sigma x^2 + \quad + a_N \Sigma x^N = \Sigma y \\
a_o \Sigma x^1 &+ a_1 \Sigma x^2 + a_2 \Sigma x^3 + \quad + a_N \Sigma x^{N+1} = \Sigma y.x^1 \\
a_o \Sigma x^2 &+ a_1 \Sigma x^3 + a_2 \Sigma x^4 + \quad + a_N \Sigma x^{N+2} = \Sigma y.x^2 \qquad \text{-Gl.3-} \\
a_o \Sigma x^N &+ a_1 \Sigma x^{N+1} + a_2 \Sigma x^{N+2} + \quad + a_N \Sigma x^{2N} = \Sigma y.x^N
\end{aligned}$$

SCHÄRF und Mitarbeiter (198o) haben für die Berechnung eines Polynoms 3.Ordnung eine sehr elegante Lösung vorgestellt, wobei folgende Vorgangsweise eingehalten wird: aus den eingegebenen Wertepaaren werden die benötigten Summen der Potenzen bzw. Produkte ermittelt. Unter Zuhilfenahme des im Rechner enthaltenen Softwareprogrammes ML-02 (Matrixinversion, Determinanten und Simultangleichungen) erhält man zunächst die gesuchten Regressionskoeffizienten $a_o \ldots a_N$, worauf sich jeder beliebige Wert der gesuchten Ausgleichsfunktion mittels des Softwareprogrammes ML-o7 (Polynomentwicklung) berechnen läßt.

Der dort verwendete Rechengang wurde für das in dieser Arbeit vorgestellte Programm im wesentlichen beibehalten und für die Berechnung von Polynomen 4. und 5. Ordnung erweitert. Außerdem wurde - was für biologische und chemisch-physikalische Untersuchungen sehr wesentlich ist ein weiteres Rechenprogramm zur Ermittlung des Korrelationskoeffizienten r und der Prüfgröße TAU angefügt, wofür die Programmspeicher- und Datenspeicherkapazität des Rechners TI-59 eben noch ausreicht. Für die Berechnung der statistischen Sicherheit S (%) steht ein weiteres Programm zur Verfügung, das auf dem von NOACK (198o) für ein Rechengerät COMPUCORP SCIENTIST 326 bzw. 327 entwickelten Programm basiert. Da aber dieses Gerät mit algebraischer Logik ohne Hierarchie, der Rechner TI-59 aber mit algebraischer Logik mit Hierarchie arbeitet, war eine adäquate Umformung des Programmes erforderlich.

In der Praxis ergibt sich kaum jemals die Notwendigkeit Polynome von höherem als dem 5.Grad zu verwenden. Sollte dies der Fall sein, wäre es zweckmäßig, diese Aufgabe einer Rechenanlage entsprechender Leistungsfähigkeit zu übertragen. Auch WAGNER (198o) schlägt unter anderem vor, für die Zusammenhänge zwischen Wasserführung und Nährstoffkonzentration Polynome heranzuziehen, deren Potenzexponenten im Bereich von N -3 bis N +3 liegen. Da aber oftmals durch Anwendung des nächsthöheren gerad- oder ungeradzahligen Polynoms eine etwas bessere Anpassung erreicht werden kann, scheint der Einsatz eines Polynoms 4. bzw. 5. anstelle eines solchen 2. oder 3. Ordnung noch durchaus gerechtfertigt.

Rechenprogramme zur Ermittlung von Polynomen 3. bis 5.Ordnung:

Die vorliegende Arbeit beschränkt sich aus den oben angeführten Gründen auf die Berechnung von Polynomen bis zur 5. Ordnung aus einer Zahl von n Wertepaaren $(x_i;y_i)$.

Der Korrelationskoeffizient r, der die Güte der Anpassung eines Polynoms

$$y \quad a_o + a_1 . x + a_2 . x^2 + \qquad a_N . x^N$$

an die gegebenen Meßpunkte P_1

$$P_1(x_1/y_1),\ P_2(x_2/y_2), \qquad P_n(x_n/y_n)$$

beschreibt, kann nach der folgenden allgemeinen Formel berechnet werden

$$r = \frac{\sum_{k=o}^{k=n} (a_k \sum y . x^k) - \frac{1}{n} . (\sum y)^2}{\sum y^2 - \frac{1}{n} . (\sum y)^2} \qquad \text{- Gl. 4}$$

$$0 \leqslant r \leqslant 1$$

Bei perfekter Korrelation muß sich nunmehr für r der Wert 1 ergeben; ist r 0 oder nahe 0, so kann ein Zusammenhang der Werte x_i und y_i mit der angenommenen Modellfunktion nicht nachgewiesen werden. Wie weiter oben bereits angeführt, wird aus dem Korrelationskoeffizienten r die Prüfgröße TAU nach folgender Formel berechnet.

$$TAU = \sqrt{[n - (N + 1)] \frac{r}{1 - r^2}} \qquad \text{- Gl. 5}$$

Durch Eingabe der Prüfgröße TAU und der Anzahl der Freiheitsgrade f n (N + 1); (n Anzahl der Wertepaare; N Grad

des Polynoms) in das Rechenschema für die Integration der t-Verteilung erhält man schließlich die statistische Sicherheit S (%) als objektives Maß für die Richtigkeit der getroffenen Annahme. In diesem Fall soll der Wert für S üblicherweise mehr als 95 % betragen.

Das für die Integration der t-Verteilung benötigte Programm beruht auf Angaben von NOACK, der seinerseits auf die Rekursionsrechnungen nach DUDEWICZ und DALAL zurückgreift. Dabei sind drei verschiedene Lösungswege für f 1; f >1, ungerade und f >1, gerade; zu unterscheiden (siehe Tabellen I und II).

Die Programmdurchführung ist aus Tabelle III zu ersehen, wobei ein Polynom 3.Ordnung als Beispiel herangezogen wurde. Für Polynome 4. bzw. 5. Ordnung ist der Befehl "C" nach der Zeile "3.Koeffizientenberechnung" sinngemäß vier- bzw. fünfmal einzugeben.

Abschließend soll bemerkt werden, daß der Vorteil der Anwendung kleinerer Rechengeräte unter anderem auch darin zu sehen ist, daß zahlreiche, im Lauf wissenschaftlicher Arbeiten immer wieder anfallende Berechnungen unverzüglich durchgeführt werden können, wobei der Wegfall der zumeist längeren Vorbereitungs- und Wartezeit, mit der bei der Benützung einer größeren EDV-Anlage stets gerechnet werden muß, ebenso als Vorteil betrachtet werden muß wie die Möglichkeit der individuellen Anpassung des Rechenganges an die jeweiligen Erfordernisse (siehe dazu auch CHRISTIAN und TUCKER 1982).

TABELLE 1:

Gleichungen zur Integration der t-Verteilung:

$$h(t) \quad \frac{1}{\sqrt{\pi \cdot f}} \; \frac{\left(\frac{f-1}{2}\right)!}{\left(\frac{f-2}{2}\right)!} \left(1 + \frac{t^2}{f}\right)^{-\frac{f+1}{2}}$$

$$S\ (\%) \quad 100 \int_{-t}^{+t} h(t)\, dt$$

$$\frac{t}{\sqrt{f}} \qquad \frac{1}{1 + x^2} \quad v; \sqrt{\frac{1}{1 + x^2}} \quad \sqrt{v} \quad w$$

<u>wenn f = 1:</u> $S \quad 100 \frac{2}{\pi} \arctan x\ (\%)$

<u>wenn f > 1:</u> $S \quad 100 \frac{2}{\pi} \left(\arctan x + R \sqrt{1 \quad v} \right)$
(ungerade)

mit

$$R \quad w + \frac{2}{3} v.w + \frac{2.4}{3.5} v^2.w + \qquad \frac{2.4.6....(f-3)}{3.5.7....(f \quad 2)} \quad v^{\left(\frac{f-2}{2}\right)}.w$$

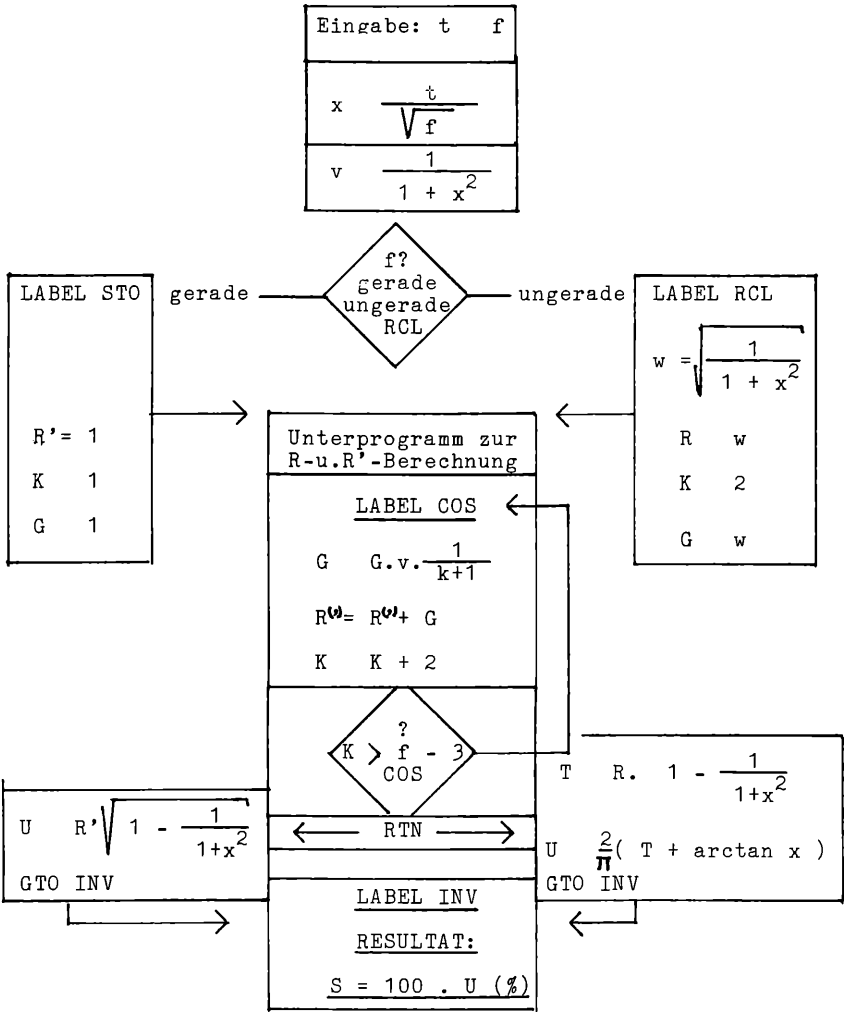
<u>wenn f > 1:</u> $S \quad 100\ R' \sqrt{1 \quad v}\ (\%)$
(gerade)

mit

$$R' \quad 1 + \frac{1}{2} v + \frac{1.3}{2.4} v^2 + ...\frac{1.3.5.....(f-3)}{2.4.6.....(f-2)} \quad v^{\left(\frac{f-2}{2}\right)}$$

TABELLE II.

Integration der t-Verteilung:



Anmerkung: Das Rechenprogramm kann vom Autor zur Verfügung gestellt werden.

Tabelle III

Programmdurchführung für Ausgleichskurven 3. bis 5. Ordnung

Gegeben sind n Wertpaare (x_i/y_i)

Gesucht: die Koeffizienten $a_o \cdots a_n$ des Polynoms n.Ordnung; der Korrelationskoeffizient r; die Prüfgröße TAU; beliebige Werte für die Funktion $y = f(x)$ - Einzelwerte oder Werte im Bereich $x_o < \Delta x < x_E$.

Anweisung	Eingabe	Befehle	Anzeige	Print
1. Vorbereitung (Löschen)		E'	479.59	479.59
2. Wertpaare eingeben	x_i	A	x_i	
	y_i	B	y_i	$x_i;y_i;$
3. Koeffizientenberechnung		R/S	|A|; a_o	A a_o
		C; C; C;	a_1 .a_n	a_1 .a_n
4. Berechn.d.Korrelations-koeffizienten r		D	r	r
5. Prüfgröße TAU		B'		
6. Eingabe von x_E	x_E	C'	x_E	x_E
Eingabe von Δx	Δx	D'	Δx	Δx
7. Einzelwerte $y_i = f(x_i)$ berechnen	x_i	C';E	$x_i;y_i$	$x_i;y_i$
8. y-Werte im Bereich $x_o < x_i < x_E$ berechnen	x_o	E	y_o	y_o
	. x_i		. y_i	. y_i

Tabelle III (Fortsetzung)

Programmdurchführung für die Bestimmung der statistischen Sicherheit S (%)
(Integration der t-Verteilung); Berechnung von t (TAU) aus dem Korrelationskoeff. r.

Anweisung	Eingabe	Befehl		Anzeige	Print
1. Eingabe von t (TAU)	t	A		t	t
2. Eingabe d.Freiheitsgrade					
wenn f >1	f	B		f	f
wenn f 1		C			
			Resultat:	S(%)	S(%)
Berechnung von t (TAU)					
1. Eingabe: Ordnung des untersuchten Polynoms	N	D		N	N GR N
2. Anzahl der Wertepaare	n	D'		n	N KL N
Eingabe des Korrelationskoeff.		E			r R
			Resultat:	t (TAU)	t TAU

Rechenprogramm für ein Polynom 3.Grades (einschl. r u.t)

000	00	LBL	050	44	SUM	100	98	ADV	150	07	07
001	10	E'	051	30	35	101	91	R/S	151	71	SBR
002	47	CMS	052	25	CLR	102	36	PGM	152	50	I×I
003	29	CP	053	16	A'	103	02	02	153	91	R/S
004	22	INV	054	44	SUM	104	13	C	154	76	LBL
005	58	FIX	055	09	09	105	76	LBL	155	14	D
006	06	6	056	44	SUM	106	43	RCL	156	53	(
007	69	OP	057	12	12	107	73	RC*	157	43	RCL
008	17	17	058	16	A'	108	00	00	158	32	32
009	91	R/S	059	44	SUM	109	85	+	159	33	X²
010	76	LBL	060	10	10	110	03	3	160	55	÷
011	11	A	061	44	SUM	111	01	1	161	43	RCL
012	42	STO	062	13	13	112	95	=	162	40	40
013	06	06	063	44	SUM	113	42	STO	163	54	
014	91	R/S	064	16	16	114	38	38	164	42	STO
015	76	LBL	065	16	A'	115	43	RCL	165	43	43
016	16	A'	066	44	SUM	116	00	00	166	20	CLR
017	43	RCL	067	11	11	117	85	+	167	53	(
018	06	06	068	44	SUM	118	04	4	168	53	(
019	65		069	14	14	119	95	=	169	43	RCL
020	92	RTN	070	44	SUM	120	42	STO	170	05	05
021	76	LBL	071	17	17	121	37	37	171	65	
022	12	B	072	44	SUM	122	73	RC*	172	43	RCL
023	32	X:T	073	20	20	123	38	38	173	32	32
024	02	2	074	16	A'	124	72	ST*	174	85	+
025	07	7	075	44	SUM	125	37	37	175	43	RCL
026	42	STO	076	15	15	126	69	OP	176	06	06
027	00	00	077	44	SUM	127	30	30	177	65	
028	04	4	078	18	18	128	97	DSZ	178	43	RCL
029	42	STO	079	44	SUM	129	36	36	179	33	33
030	30	36	080	21	21	130	43	RCL	180	85	+
031	42	STO	081	16	A'	131	25	CLR	181	43	RCL
032	07	07	082	44	SUM	132	30	PGM	182	07	07
033	69	OP	083	19	19	133	02	02	183	65	
034	28	28	084	44	SUM	134	15	E	184	43	RCL
035	43	RCL	085	22	22	135	03	3	185	34	34
036	06	06	086	16	A'	136	42	STO	186	85	+
037	99	PRT	087	44	SUM	137	04	04	187	43	RCL
038	32	X:T	088	23	23	138	05	5	188	08	08
039	99	PRT	089	25	CLR	139	42	STO	189	65	
040	65		090	43	RCL	140	01	01	190	43	RCL
041	44	SUM	091	32	32	141	44	SUM	191	35	35
042	32	32	092	33	X²	142	00	00	192	75	
043	16	A'	093	44	SUM	143	76	LBL	193	43	RCL
044	44	SUM	094	42	42	144	13	C	194	43	43
045	33	33	095	43	RCL	145	73	RC*	195	54	
046	16	A'	096	08	08	146	00	00	196	55	
047	44	SUM	097	42	STO	147	69	OP	197	53	
048	34	34	098	40	40	148	20	20	198	43	RCL
049	[illegible]	A'	099	99	PRT	149	[illegible]	PGM	199	42	42

```
200  75  -
201  43 RCL
202  43  43
203  54
204  54
205  3
206  95  =
207  42 STO
208  44  44
209  98 ADV
210  99 PRT
211  91 R/S
212  76 LBL
213  17 B'
214  43 RCL
215  44  44
216  33 X²
217  42 STO
218  45  45
219  53
220  03
221  53
222  01
223  75
224  43 RCL
225  45  45
226  54
227  55  ÷
228  43 RCL
229  45  45
230  54
231  35 1/X
232  65
233  53
234  43 RCL
235  40  40
236  75
237  04
238  54
239  54
240  34
241  95  =
242  99 PRT
243  91 R/S
244  76 LBL
245  15  E
246  42 STO
247  57  57
248  36 PGM
249  07  07
250  13  C
251  29 CP
252  25 CLR
253  43 RCL
254  59  59
255  32 X:T
256  43 RCL
257  57  57
258  95  =
259  67  EQ
260  42 STO
261  71 SBR
262  44 SUM
263  61 GTO
264  15  E
265  91 R/S
266  76 LBL
267  44 SUM
268  43 RCL
269  58  58
270  44 SUM
271  57  57
272  43 RCL
273  57  57
274  92 RTN
275  76 LBL
276  42 STO
277  91 R/S
278  76 LBL
279  18 C'
280  42 STO
281  59  59
282  99 PRT
283  91 R/S
284  76 LBL
285  19 D'
286  42 STO
287  58  58
288  99 PRT
289  91 R/S
```

Rechenprogramm zur Integration der t-Verteilung:

```
000
001
002
003  08
00   55
005  53
006  43  RCL
007  08   08
008  85
009  01
010  54
011  65
012  13
013  04
014  65
015  43  RCL
016  06   06
017  54
010      STO
019       06
020      SUM
021       07
022  03
023  03
024  43
025  08
026  85
027  02
020  5
029
030
031
032
033
034
035   0
036  43  RCL
037  02   02
     54
     00
     29  CP
 041 22  INV
042  77   GE
043      COS
         PTN
```

```
050  00
051  43
052  00
053  95
054  32
055  03
056  06
057  05
058  05
059  06
060  01
061  05   5
062  06   6
063  10  E'
064  98  ADV
065  91  R/S
066  76  LBL
067  12   B
068  32
069  02   2
070  01   1
071  00  OP
072  04   04
073  32  X:T
     42  STO
     02   02
     00  OP
          06

009
090
091  00
092  95
093  42
094  04   04
095      RCL
          02
096
097
098
099
```

```
100  22  INV
101  59  INT
102  29  CP
103  22  INV
10   67   EQ
105  43  RCL
106  76  LBL
107  42  STO  10
108  01       158
109  42    0  159
110   06   06  160
111  42  STO  161
112  07   07  162
113  42  STO  163
114  08   08  164
115  71  SBR  165
116  30  COS  166
117  53       167
118  53       168
119  01       169
120  75       170
121           171
122           172
123           173
124           17
125           175
126      RCL  176
127       07  177
128           78
129        0  179
130       09  180
131      STO  181
132           182
133           183
134           18
135           185
136           0
137
130
139
 40
141
142
 43
```

```
04   04
34  ΓX
42  STO
05   05
42  STO
06   06
42  STO
07   07
     2
    STO

    RCL
     07
      +
    RCL
     03
    INV
    TAN

02
55

     0
     00
    GTO
    INV
    LBL
     C
     2
```

200	05	05
201	25	CLR
202	70	RAD
203	43	RCL
204	01	01
205	22	INV
206	30	TAN
207	65	
208	02	2
209	00	0
210	00	0
211	55	
212	89	
213	95	
214	32	
215	03	3
216	06	6
217	05	5
218	05	5
219	06	6
220	01	1
221	05	5
222	06	6
223	10	E'
224	98	ADV
225	91	R/S
226	76	LBL
227	61	GTO
228	25	CLR
229	02	2
230	04	
231		
232	01	
233	03	
234	07	
235	01	
236	07	
237	02	2
238	02	2
239	69	OP
240	01	01
241	03	3
242	05	
243	01	
244	03	
245	03	
246	07	
247	02	
248	04	
249	03	

250	02	2
251	69	OP
252	02	02
253	03	3
254	01	
255	00	
256	00	
257	01	
258	06	
259	04	
260	00	
261	03	
262	07	
263	69	OP
264	03	03
265	02	2
266	00	0
	04	4
	02	2
	01	1
270	07	7
271	03	
272	05	5
273	03	3
274		7
275		
276		04
277		OP
278		05
279		CLR
280		RTN
281		
282		
283		0
284	16	16
285	32	X:T
286	69	OP
287	00	00
288	02	2
289	02	2
290	03	3
291	05	5
292	00	0
293	00	0
294	03	3
295	01	1
296	10	E'
297	91	R/S
298	76	LBL
299		D'

300	42	STO
301	17	17
302	32	X:T
303	02	2
304	06	6
305	02	2
306	07	7
307	00	0
308	00	0
309	03	3
310	01	1
311	10	E'
312	04	R/S
313		LBL
314		E
315		STO
316		18
317		'T
318		
319		0
320		E'
321		RCL
322		18
323		X²
324		STO
325		19
326		
327		RCL
328		19
329		
330		
331		
332		
333		
334		
335		
336		
337		
338		
339		
340		
341		
342		
343	04	
344	54	
345	44	
346		=
347		STO
348		20
349		X:T

350	03	
351	07	
352	01	
353	03	
354	04	
355	01	1
356		E'
357		ADV
358		R/S
359		LBL
360		E'
361		OP
362		04
363		X:T
364		OP
365		06
366		CLR
367		RTN

LABELS-:

001	COS
046	INV
067	D
107	STO
	0
	D'
	E
	E'

Literatur

CHRISTIAN, S.D., TUCKER, E.E. (1982): Least squares analysis with the microcomputer. Linear Relationships. Part One.- International Laboratory, Nov./Dec.1982, 46-51.

HÜLLE, W. (1981): Kanalberechnungen mit programmierbaren Taschenrechnern.-Korr. Abwasser, Jg.28, Nr.9, 646-647.

LAUBE, F.W. (1982): Programmierbare Taschenrechner in der Abwassertechnik. - Korr. Abwasser, Jg. 29, H.1, 46-47.

NOACK, S. (1980): Auswertung von Meß- und Versuchsdaten mit Taschenrechnern und Tischkomputer. - Walter de Gruyter, Berlin, New York.

RODINGER, W. (1982): 1. Mitteilung: Auswertung biologischer Meßdaten mit dem technisch-wissenschaftlichen Rechengerät "DIEHL-ALPHATRONIC". - Wasser und Abwasser, Bd. 25, 160-169.

SCHÄRF et al. (1980): Programmieren mit den Taschenrechnern TI-58 und TI-59. - R.Oldenbourg, Verlag Wien München.

SLANINA, K. (1981): Zeller See - Limnologische Entwicklung; Ergebnis der Basisuntersuchung 1979. - Wasserwirtschaftskataster Teil I. Grundlagen der Wasserwirtschaft BMLF, Wien.

SYDLER, P.A., ZOLLINGER, F. (1983): Hochwasserberechnungen aus kleinen Einzugsgebieten mit Taschenrechner und Landkarte. - Wasserwirtschaft, Jg. 73, H.1. 12-16.

WAGNER, G. (1980): Aus: OECD Eutrophication Programme, Regional Project, Alpine Lakes, Kapitel X, S. 209.

Anschrift des Verfassers: W.Hofrat Dipl.-Ing.Dr. Lambert J. OTTENDORFER, Bundesanstalt für Wassergüte, Schiffmühlenstraße 120, 1223 Wien.

3.Mitteilung: M.FRIEDRICH und L.J.OTTENDORFER

Programm zur Berechnung des Massenabsorptionskoeffizienten der β^--Strahlung mit TI-59.

Einleitung:

Aus den Meßwerten der Selbstabsorptionskurve nach der Methode der konstanten Gesamtaktivität wird unter Anwendung der Gauß'schen Minimumsbedingung der Massenabsorptionskoeffizient nach einem Verfahren der schrittweisen Annäherung berechnet.

Strahlungsabsorption: Die Elektronen der β^--Strahlung geben beim Durchdringen von Materie ihre Energie über mehrere Wechselwirkungsprozesse an das Absorbermaterial ab. Die Wichtigsten sind die Ionisation und Anregung von Atomen und die elastische oder unelastische Streuung an Atomkernen und Elektronen, wobei im Fall der unelastischen Streuung an Kernen Bremsstrahlung emittiert wird.

Absorptionsgesetz: Für ein enges, paralleles Strahlenbündel wird die Absorption der β^--Strahlung annähernd quantitativ richtig durch das exponentielle Absorptionsgesetz

$$z = z_0 e^{-\mu d}$$

d	durchstrahlte Schichtdicke
z, z_0	Zählraten für Schichtdicke d bzw. 0

beschrieben.

Absorptionskoeffizienten: Die energieabhängige Konstante μ (cm^{-1}) wird als linearer Absorptionskoeffizient bezeichnet. μ wird auch makroskopischer Wirkungsquerschnitt genannt, da man den linearen Absorptionskoeffizienten anschaulich als das Verhältnis der absorptiv wirksamen Fläche (cm^2) der Atomkerne und dem Volumen (cm^3) in dem diese enthalten sind, auffassen kann. Bezogen auf die Dichte des Absorbermaterials ϱ spricht man vom Massenabsorptionskoeffizienten $a = \mu/\varrho$ (cm^2/g) bzw. (cm^2/mg). Entsprechend geht im Exponenten des

Absorptionsgesetzes d in ϱd, die Flächenmasse mg/cm^2 über.
Also:

$$Z = Z_0 e^{-\alpha x}$$

Massenabsorptionskoeffizient
Flächenmasse

Selbstabsorption : Bei den ß-Strahlern kleiner und mittlerer Energien gilt lediglich für vernachlässigbare Flächenmassen sogenannte "unendlich dünne" Präparate daß die gemessene Zählrate direkt proportional der Aktivität ist. Für nicht mehr vernachlässigbare Flächenmassen tritt eine Absorption der β^--Strahlung innerhalb des Präparates auf, die Selbstabsorption.

Die Wirkung der Selbstabsorption wird am besten aus dem Verlauf der Selbstabsorptionskurve bei konstanter spezifischer Aktivität ersehen. Erhöht man die Flächenmasse bei konstanter spezifischer Aktivität, so geht die gemessene Impulsrate bei steigender Gesamtaktivität gegen einen Sättigungswert. Bei weiterer Erhöhung der Schichtdicke des Präparates liefern die untersten Schichten keinen Beitrag mehr zur Impulsrate, da ihre Aktivität vollständig in der darüberliegenden Schicht absorbiert wird. Mit dem Ansatz des exponentiellen Absorptionsgesetzes ergibt sich durch Integration über die Schichtdicke bzw. die Flächenmasse:

$$A = A_\infty (1 - e^{-\alpha x})$$

Dem Sättigungswert der Aktivität kann eine Sättigungsschichtdicke zugeordnet werden. Für Messungen unbekannter Präparate in sättigungsdicker Schicht kann durch Vergleich mit Kalibrierpräparaten ein Faktor für die spezifische Aktivität erhalten werden. Für unterhalb der Sättigung liegende Flächenmassen muß jedoch die von der Flächenmasse abhängige Selbstabsorption durch einen in den Gesamtwirkungsgrad der Messung eingehenden Korrekturfaktor, den Selbstabsorptionsfaktor, berücksichtigt werden. Dieser wird bei Konstanz der geräte-

spezifischen Korrekturfaktoren durch das Verhältnis der gemessenen Impulsrate zu der im Präparat vorhandenen Zerfallsrate dargestellt. Der Selbstabsorptionsfaktor kann direkt der nach der Methode der konstanten Gesamtaktivität gewonnenen Selbstabsorptionskurve entnommen werden. Zu ihrer experimentellen Ermittlung werden Präparate mit zunehmender Flächenmasse angefertigt, wobei deren genau bekannte Gesamtaktivität konstant gehalten wird, indem eine genau bekannte Aktivität, etwa eine bestimmte Menge Uransalz, mit steigenden Mengen inaktivem Material versetzt wird. Trägt man das Verhältnis der gemessenen Aktivität zu Gesamtaktivität bzw. die entsprechenden Impulszahlen auf die Ordinate, die Flächenmasse auf die Abszisse auf, so ergibt sich, da die spezifische Aktivität der Präparate bei zunehmender Selbstabsorption abnimmt, eine die Ordinate im Punkt 1 schneidende, monoton fallende Kurve. Oberhalb der Sättigung verschwindet der Beitrag der Exponentialfunktion und die Kurve geht in 1/ax über. Der theoretische Verlauf der Selbstabsorptionskurve ergibt sich wie oben durch Integration über die Flächenmasse zu:

$$F = \frac{A}{A_o} = \frac{1-e^{-ax}}{ax}$$

F Selbstabsorptionsfaktor
A gemessene Aktivitätsrate
A_o ... konstante Gesamtaktivität
x Flächenmasse in mg/cm^2
a μ/ϱ ... Massenabsorptionskoeffizient in cm^2/mg

<u>Berechnung:</u>

Die Konstante a soll durch Regressionsrechnung nach der Gauß'schen Fehlerquadratmethode aus den Meßwerten A_i, x_i ermittelt werden:

$$\sum \left[F - \frac{1-e^{-ax}}{ax} \right]^2 = \text{Min!}$$

Die partielle Differentiation der Minimumsbedingung nach der Konstanten a ergibt keine einfach nach a auflösbare Bestimmungsgleichung. Gangbar, wenn auch umständlich und doch nur eine Näherung ergebend, ist der Weg über die Reihenentwicklung der Exponentialfunktion.

Programm:

Das vorgestellte TI-59-Programm erlaubt es, ausgehend von einem Näherungswert für die gesuchte Konstante a, deren Wert mit einer vorgegebenen Genauigkeit zu erhalten, indem das Minimum der als Funktion in a aufgefaßten Fehlerquadratsumme schrittweise approximiert wird. Beginnend mit einer gewählten Schrittweite +/- a werden die Funktionswerte berechnet und ihre Differenz gebildet. Durch Quotientenbildung aus der Differenz und ihrem Absolutbetrag erhält man den Wert +/-1. Tritt ein Vorzeichenwechsel auf, so wurde das Minimum mit der gewählten bzw. der aktuellen Schrittweite überschritten. Die Schrittweite wird um eine Zehnerpotenz herabgesetzt und ihr Vorzeichen umgekehrt. Dieses Verfahren wird fortgesetzt, bis die vorgegebene Genauigkeit erreicht ist.

Eingabe:

Die Genauigkeit wird durch Eingabe der Anzahl der gewünschten Nachkommastellen vorgegeben. Das Vorzeichen von a ist je nach der Lage des Näherungswertes oberhalb oder unterhalb des genauen Wertes zu wählen. Es können maximal 2o Wertepaare eingegeben werden, jedoch erhöht sich die Laufzeit stark mit der Zahl der Wertepaare.

Literatur:

GETOFF, N. (1961): Kurzes radiochemisches Praktikum.- Vlg.F.Deuticke, Wien.

HABERER, K. (1969): Radionuklide in Wasser.- Vlg.G.Thieme KG, München.

HECHT, F., ZACHERL, M.K. (Hsg.) (1955): Handbuch der mikrochemischen Methoden, Bd. II, Springer Vlg., Wien.

JAEGER, R. (1959): Dosimetrie und Strahlenschutz, Vlg. G. Thieme KG, Stuttgart.

Anschrift der Verfasser: Manfred FRIEDRICH, W.Hofr.Dipl.-Ing. Dr. Lambert J. OTTENDORFER, Bundesanstalt für Wassergüte, Schiffmühlenstraße 120, 1223 Wien.

P R O G R A M M I N S T R U K T I O N E N

Schritt	Verfahren	Eingabe	Taste	Anzeige Ausdruck
1.	Speichervorbereitung	-	2nd A'	
2.	Eingabe der konstanten Gesamtaktivität	A	2nd B'	A Σ IPM
3.	Eingabe eines Nährungswertes a für den MAK	a	2nd C'	a ?MAK
4.	Eingabe d. Schrittweite Δ a	Δa	2nd D'	Δ a INTV
5.	Eingabe der Genauigkeit	n	2nd E'	10^{-n}FEHL
6.	Eingabe der Meßwerte:			
	Flächenmasse mg/cm2	X_i	A	X_i X
	Aktivitätsrate cpm	A_i	B	A_i Y
				1.
	usw.			
7.	Programmstart	-	C	a in mg/cm2

Programm:

		LBL
001		X²
002		
003		
004		
005		ui
006		06
007		RTN
008		LBL
009		A'
010		CMS
011		SBR
012		ΓX
013		CLR
014		R/S
015		LBL
016		ΓX
017		3
018	09	
019	42	STO
020	00	00
021	42	STO
022	02	02
023	05	5
024	09	9
025	42	STO
026	01	01
027	42	STO
028	03	03
029	92	RTN
030	91	R/S
031		LBL
032	1	B'
033	42	STO
034	08	08
035	32	X:T
036	07	
037	07	
038	02	2
039	04	4
040	03	
041	03	
042	03	
043	00	
044	71	
	33	
	1	
	76	LBL
	18	C'
	42	STO
	10	10
	32	X:T
	07	
	01	
	03	
	00	

061		
062		
063		LBL
064		D'
065	42	STO
066	11	11
067	32	X:T
068	02	2
069	04	
070	03	
071	01	
072	03	
073	07	
074	04	4
075	02	2
076	71	SBR
077	33	X²
078	91	R/S
079	76	LBL
080	10	E'
081	32	X:T
082	01	
083	00	
084	45	
085	32	X:T
086	94	
087	95	=
088	42	STO
089	14	14
090	32	X:T
091	02	2
092	01	1
093	01	
094	07	
095	02	2
096	03	3
097	02	2
098	07	7
099	71	SBR
100	33	X²
101	69	OP
102	00	00
103	29	CP
104	91	R/S
105	76	LBL
106	11	A
107	72	ST*
108	00	00
109	32	X:T
110	04	
111	04	
	71	SBR
	33	X²
	69	OP
	30	30
		R/S
	0	LBL
	12	B
	32	T
	04	
	05	

122	71	SBR
123	33	X²
124	29	CP
125	55	
126	43	RCL
127	08	08
128	95	=
129	72	ST*
130	01	01
131	69	OP
132	31	31
133	01	1
134	44	SUM
135	07	07
136	43	RCL
137	07	07
138	42	STO
139	09	09
140	99	PRT
141	91	R/S
142	76	LBL
143	13	C
144	53	
145	73	RC*
146	03	03
147	75	
148	53	
149	53	
150	01	
151	75	
152	53	
153	03	
154	73	RC*
155	02	02
156	65	
157	43	RCL
158	10	10
159	54	
160	42	STO
161	04	04
162	94	+/-
163	22	INV
164	23	LNX
165		
166	04	
167		÷
168		RCL
169		04
170		
171		
172		
173		=
17		SUM
		05
		OP
		32
		OP
		33
		DSZ
		07

183	87	IFF
184	01	01
185	32	X:T
186	43	RCL
187	05	05
188	42	STO
189	06	06
190	86	STF
191		01
192		LBL
193	22	INV
194	43	RCL
195	09	09
196	42	STO
197	07	07
198	43	RCL
199	06	06
200	55	
201	24	
202	50	
203	95	=
204	42	STO
205	12	12
206	85	+
207	43	RCL
208	13	13
209	95	=
210	32	X:T
211	00	0
212	67	EQ
213	23	LNX
214	43	RCL
215	12	12
216	42	STO
217	13	13
218	61	GTO
219	25	CLR
220	76	LBL
221	23	LNX
222		RCL
223		11
224		-
225		
226		
227		
228		=
229		STO
230		11
231		1 I
232		X:T
233		RCL
234	14	14
235	77	GE
236		CE
237		GTO
238		CL
239		LBL
240		CE
24		ADV
24		PCL
		10

244	32	
245	06	6
246	04	4
247	03	3
248	00	0
249	01	1
250	03	3
251	02	2
252	06	6
253	71	SBR
254	33	X²
255	29	CP
256	69	OP
257	00	00
258	43	RCL
259	10	10
260	91	R/S
261	76	LBL
262	25	CLR
263	43	RCL
264	11	11
265	44	SUM
266	10	1
267	71	SBR
268	34	ΓX
269	43	RCL
270	05	05
271	42	STO
272	06	06
273	25	CLR
27	42	STO
275	05	05
276	61	GTO
277	13	C
278	76	LBL
279		X:
280		
281		
282		
283		
284		
285		
286		

Label:

	C
	D
	E
1	
221	
240	

4.Mitteilung: M.FRIEDRICH und W.KRONER

Meßwertverarbeitung in der radiologischen Überwachung von Oberflächengewässern in Österreich

Zusammenfassung: Die Nutzung einer kleinen Datenverarbeitungsanlage in der radiologischen Umweltüberwachung zur Erstellung versandfertiger Tabellen der Meßergebnisse wird beschrieben. Zur Erläuterung der Tabelle werden Auftrag, Ziel und Methodik der Überwachung kurz umrissen.

Die Fachabteilung Radiologie der Bundesanstalt für Wassergüte führt bereits seit dem Jahre 196o im Auftrag des Bundesministeriums für Land- und Forstwirtschaft monatliche Messungen der Radioaktivität wichtiger österreichischer Seen und Fließgewässer durch. Im österreichischen Strahlenschutzgesetz vom 11.Juni 1969, § 37, wurde der Bundesanstalt für Wassergüte damals Bundesanstalt für Wasserbiologie und Abwasserforschung -der Auftrag erteilt, die großräumige Überwachung und Überprüfung der Umwelt auf radioaktive Verunreinigungen durchzuführen.

Zu den im Sinne o.a. Bundesgesetzes zählen, nach Hauptflußgebieten geordnet, folgende Gewässer:

I.	Rheingebiet:	Rhein (Lustenau), Bodensee (Bregenz), Ill (Gisingen)
II.	Inngebiet:	Inn (Kirchbichl), Salzach (Salzburg), Inn (Schärding)
III.	Donaugebiet:	Fuschlsee (Fuschl), Donau (Engelhartszell), Donau (Wien), Donaukanal (Wien), Donau (Hainburg), March (Angern), Leitha (Deutsch-Brodersdorf)
IV.	Rabnitz, Raab, Mur:	Neusiedler See (Neusiedl), Mur (Spielfeld)
V.	Draugebiet:	Drau (Neubrücke Gumisch).

In der österreichischen Strahlenschutzverordnung vom 12. Jänner 1972 wurde die höchstzulässige Konzentration von radioaktiven Stoffen festgelegt. Die Überwachung bezieht sich dabei auf den allgemeinsten Fall, daß Radioaktivität in Form eines Gemisches von alpha-, beta- und gammastrahlenden Nukliden in unbekannter Zusammensetzung vorliegt. Da auch mit Nukliden höherer Radiotoxizität gerechnet werden muß, liegt der Wert der höchstzulässigen Konzentration in Wasser nach der StVO für beliebige Gemische entsprechend niedrig und beträgt 1.10^{-7} $\mu Ci/cm^3$ 100 pCi/l. Für Trinkwasser darf 1/30 dieses Wertes nicht überschritten werden.

Die radioaktiven Inhaltsstoffe der Oberflächengewässer setzen sich aus den radioaktiven Nukliden der natürlichen Zerfallsreihen, dem globalen Anteil des radioaktiven Fallouts und lokalen Anteilen an radioaktiver Verunreinigung aus industriellen und sanitären Abwässern, Abwässern der Forschungslaboratorien und Spitäler sowie in- und ausländischen Reaktorabwässern zusammen. Wie für die Glieder der natürlichen radioaktiven Zerfallsreihen, gilt auch für die Radioaktivität des im natürlichen Kalium zu 0,0118 % enthaltenen, beta-gamma-aktiven primordialen Nuklids K-40, daß dieselbe nicht als Beitrag zur Strahlenbelastung im Sinne der Begriffsbildung des Strahlenschutzgesetzes zu verstehen ist. Der in Grund- und Oberflächengewässern stets vorhandene K-40-Beitrag zur Gesamt-beta-Aktivität könnte eine Überschreitung der höchstzulässigen Aktivitätskonzentration mit sich bringen. Daher wird der Kaliumgehalt aller Wasserproben flammenphotometrisch bestimmt. Die daraus berechnete K-40-Aktivität wird von der gemessenen Gesamt-beta-Aktivität abgezogen. Der erhaltene Wert wird als Rest-beta-Aktivität bezeichnet und stellt den für die radiologische Beurteilung relevanten Meßwert dar.

Die Methodik der Radioaktivitätsmessungen in der Überwachung muß den durch die Toleranzgrenzen gestellten Anforderungen genügen. Die Abteilung Radiologie der Bundesanstalt für Wassergüte folgt im wesentlichen den methodischen Richtlinien des Deutschen Einheitsverfahrens C 7*, welches sich zur Anreicherung der im Wasser gelösten Radionuklide des Eindampfverfahrens bedient. Die Bestimmung der Aktivitätskonzentration in Wasser erfolgt durch Messung der Gesamtbeta und der Gesamt-alpha-Aktivität des getrockneten Eindampfrückstandes. Eine Kalibrierung wird bezüglich der Alpha-Messungen mit Vergleichspräparaten auf Natur-Uran-Basis, bezogen auf die Beta-Messungen mit Kaliumnitrat-Präparaten durchgeführt. Kaliumsalze werden bevorzugt zur Herstellung von ß-Kalibrierstandards verwendet, da sie das Nuklid K-4o im konstanten und genau bekannten natürlichen Isotopenverhältnis enthalten, ihre spzifische Aktivität für Low-Level-Messungen günstig liegt, die mittlere Beta-Energie etwa der des Spaltproduktgemisches entspricht, und K-4o zudem beim derzeitigen Niveau des radioaktiven Fallouts einen und oft den wesentlichen Anteil der Gesamt-beta-Aktivität der Oberflächengewässer liefert.

Das Kalibrierverfahren ergibt den Beta-Eichfaktor:

$$F(x) = \frac{n_{th}}{n_{St} - n_o} \cdot 0{,}45$$

x Flächenmasse in mg/cm^2
n_{th}.. theoret.Zerfallsrate
n_{St}.. gemessene Impulsrate
n_o Leerwert
1 Ipm (Impuls/min)= o,45 pCi

Die Angabe der Beta-Aktivität erfolgt daher als Kalium-Äquivalent.

Zur Messung der Radioaktivität stehen zwei gleichartige, mit einem Gemisch Argon-Methan 9:1 betriebene Low-Level-Gasdurchflußzählgeräte zur Verfügung. In Verbindung mit Probenwechslern für je 24 Proben gestatten diese Geräte bei Vorwahl von Meßzeit oder Impulszahl die gleichzeitige Messung von Alpha- und Beta-Aktivität, wobei die Unterscheidung der Strahlenart durch die konstruktive Ausführung des Zählrohres in Schichtbauweise einerseits und verschiedene Zählspannungen andererseits gegeben ist. Der Zählraum ist durch eine Aluminium-bedampfte Kunststoffolie von o,4 mg/cm^2 Flächengewicht abgeschlossen. Nach Beendigung jeder Einzelmessung durch Ablauf der vorgewählten Meßzeit oder Erreichen der vorgegebenen Impulszahl werden auf einem Fernschreib-Terminal die Positionsnummer der Probe im Probenwechsler, die Meßzeit und die Impulszahlen Beta sowie Alpha gleichzeitig über Drucker und Lochstreifen ausgegeben. Die nächste Probe wird automatisch unter das Zählrohr gebracht und die Messung gestartet.

Die statistischen Schwankungen der Zerfallsereignisse setzen der Meßgenauigkeit eine Grenze. Bedingt durch die niedrigen Aktivitäten der meisten Wasserproben muß daher zur Erzielung der geforderten Genauigkeit für jede Probe eine ausreichende Anzahl von Einzelmessungen durchgeführt werden. In jeder Meßserie läuft mindestens ein leeres Zählschälchen zur Messung des Nulleffektes der Apparatur mit.
Zur Berechnung der Gesamt-beta-Aktivität werden zunächst die Einzelzählraten und Einzelmeßzeiten für Proben und Leerwert summiert und die Impulsraten pro Minute gebildet.

	N_o	Gesamtzahl der Impulse Leerwert
	t_o	Gesamtmeßzeit Leerwert
	N_p	Gesamtzahl der Impulse Probe
	t_p	Gesamtmeßzeit Probe
$\bar{n}_o$	N_o/t_o	Impulsrate Leerwert
$\bar{n}_p$	N_p/t_p	Impulsrate Probe

Desgleichen wird mit den Alpha-Zählraten verfahren. Aufgrund der hohen Selbstabsorption der Alpha-Strahlung in der Probe entstammen diese nur der Oberflächenschicht, während die unteren Schichten keinen Beitrag liefern. Die Alpha-Aktivität dieser sättigungsdicken Schichten gibt die spezifische Aktivität der Probe, die mit der Probenmasse zu multiplizieren ist. Die Selbstabsorption der Beta-Strahlung ist dagegen geringer, so daß die Eindampfrückstände von Wasserproben mit einem Volumen von 1 l den Sättigungsbereich nicht erreichen. Die Zählraten sind der Gesamtaktivität in der Probe proportional und die Selbstabsorption wird durch den Eichfaktor F(x) berücksichtigt. Daher ist die Gesamtbeta-Aktivität:

$$A_\beta = (\bar{n}_p - \bar{n}_o) \cdot \frac{F(x)}{V}$$

in pCi/l, x Flächenmasse in mg/cm

Infolge der statistischen Natur des radioaktiven Zerfalls kann eine Zerfallszahl Z nur mit einer Streubreite gemessen werden, die proportional der Wurzel aus Z ist. Angewendet auf die Impulszahlen ergibt sich nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz für die obige Gesamt-beta-Aktivität ein mittlerer statistischer Fehler

$$\sigma \quad \text{prop.} +/- \quad \sqrt{\frac{N_o}{t_o^2} + \frac{N_p}{t_p^2}}$$

Etwa 68 % der Meßwerte sind im Bereich A +/-σ zu erwarten. Angegeben wird mit +/- 1,96 σ der Bereich für 95 %ige statistische Sicherheit bei Beta-Aktivitäten, während die im Low-Level-Bereich stärker streuenden Alpha-Ergebnisse mit einfachem σ angegeben werden.

Nach Beendigung der Meßserie liegen die Einzelmeßergebnisse auf einem oder mehreren Lochstreifen in folgender Form vor:

verschlüsselt im ASCII-Code kennzeichnet ein ":00" den Beginn einer Einzelmessung; es folgen

die Positionsnummer

die Zeitdauer der Messung

die gemessene Impulszahl der Beta-Aktivität

die gemessene Impulszahl der Alpha-Aktivität.

Zusätzlich zu diesen auf einem Datenträger festgehaltenen Meßergebnissen sind Angaben über die Probe wie z.B. Protokollnummer, Volumen und Masse der Probe sowie auch Angaben zur Probennahme bedeutungsvoll, sie werden während des Programmablaufes in die Alphatronic eingetippt.

Der Bedarf an Speicherplätzen kann dadurch klein gehalten werden, daß nur ein Teil der Daten während des ganzen Programmablaufes abrufbar sein muß. So genügt es für den Großteil der ergänzenden Angaben, daß diese Daten an einer bestimmten Stelle im Programm eingegeben werden und zur Verfügung stehen; es ist aber nicht erforderlich, daß diese Daten bis zum Ende des Programmablaufs gespeichert werden. Eine weitere Herabsetzung des Speicherplatzbedarfs wird durch die Auswertung ermöglicht: Es genügt,die pro Zählschälchen wiederholten Messungen von Zeitspannen und Impulszahlen in Summe zu kennen, daher reichen für die Speicherung der Impulszahlen Alpha, der Impulszahlen Beta und der Meßdauer jeweils 24 Speicherplätze aus.

Die Eingabe der Daten und ihre Verarbeitung werden im folgenden überblicksmäßig beschrieben, die Einteilung in Programmabschnitte orientiert sich an den einzelnen selbständigen Blöcken, aus denen das Programm aufgebaut ist.

Die Anzahl der Entnahmeorte und auch die Reihenfolge ihres Ausdrucks ist frei wählbar und wird am Beginn des Programm-

ablaufs festgelegt. Der Entnahmeort wird verschlüsselt als zweistellige "Ortskennzahl" eingegeben; dabei kennzeichnet in dekadischer Codierung die erste Ziffer das Hauptflußgebiet und die zweite Ziffer den Ort. Die Zuordnung der Ortskennzahl zu den Meßwerten und zu den ergänzenden Angaben wird dadurch hergestellt, daß unmittelbar vor der Ortskennzahl die Positionsnummer und die zugehörige Protokollnummer eingegeben werden. Die drei Zahlen: Positionsnummer, Protokollnummer und Ortskennzahl werden zusammen in eine Zahl gepackt und gespeichert. Meßergebnisse, welchen kein Entnahmeort und keine Protokollnummer zugeordnet sind, treten bei der Leerwertbestimmung auf und es genügt in diesem Fall die Positionsnummer einzugeben.

Die Positionsnummer der Leerwertbestimmung wird zu Beginn des Einspeicherungsvorganges eingetippt. Es folgen Tripel aus Positionsnummer, Protokollnummer und Ortskennzahl; in der Reihenfolge, in der diese Tripel eingegeben werden, erfolgt später der Ausdruck der Ergebnisse. Dieser Einspeicherungsvorgang wird nach der Eingabe von 23 Tripel automatisch beendet. Sollten jedoch weniger als 23 Tripel vom Lochstreifen eingelesen werden, so genügt es, als Positionsnummer "-1" einzutasten der Einspeicherungsvorgang wird dadurch abgeschlossen.

Nachdem festgehalten wurde, welche Positionsnummern für die Auswertung von Bedeutung sind, kann mit dem Einlesen der Meßwerte begonnen werden. Dabei wird folgendermaßen vorgegangen:
Alle Daten, die zu einer Einzelmessung gehören, werden vom Lochstreifen übernommen; sodann wird geprüft, ob die eingelesene Positionsnummer mit einer der eingetippten Nummern übereinstimmt. Im Fall einer Übereinstimmung werden die zu der aktuellen Positionsnummer gehörenden Speicherwerte aufgesucht und die eben eingelesenen Impulszahlen bzw. die Zeitspanne zu den entsprechenden Speicherwerten hinzuaddiert.

Im Falle keiner Übereinstimmung werden diese eben eingelesenen Daten nicht weiter verwendet. Auf diese Weise wird der Lochstreifen vollständig abgearbeitet und es werden die Meßwerte der gewünschten Positions- bzw. Protokollnummern in Form der Gesamtimpulszahl bzw. der Gesamtmeßdauer gewonnen. Es können auch weitere Lochstreifen, welche Daten von gewünschten Positions- bzw. Protokollnummern beinhalten, eingelesen werden. Nach Abschluß des Einlesevorganges besteht die Möglichkeit, gewisse Impulszahlen oder Meßzeiten zu verändern oder zu ergänzen. Eine derartige Veränderung ist zum Beispiel denkbar, wenn man die zu einem Leerwert eingelesenen Meßwerte durch eine Leerwertbestimmung eines längeren Zeitraumes ersetzen möchte.

Im nächsten Schritt der Programmausführung werden Überschrift und Tabellenkopf ausgedruckt. Der in der Überschrift aufscheinende Untersuchungsmonat wird durch Eintasten in Form einer Zahl zwischen 1 und 12 festgelegt.

Der folgende Programmteil führt eine Speicherung von Konstanten durch. Diese Konstanten werden dem Programm entnommen und umfassen Kennzahlen des Radioaktivitätsmeßgerätes sowie Toleranzgrenzen zur Radioaktivitätsbeurteilung und Werte zur Initialisierung von Speicherplätzen. Auch hier können Veränderungen der Speicherwerte vorgenommen werden. Den Anlaß könnte zum Beispiel eine Nacheichung des Radioaktivitätsmeßgerätes oder eine Änderung einer Toleranzgrenze zur Radioaktivitätsbeurteilung darstellen.

Durch die bisherigen Ausführungen wurden gleichzeitig mit der Fertigstellung von Überschrift und Tabellenkopf alle Vorbereitungen getroffen, um die Tabellenwerte ausrechnen und damit die Tabelle drucken zu können. Die einzelnen Zeilen der Tabelle werden mit Hilfe der gespeicherten Kennzahlen, Meßwerte und Konstanten erarbeitet und durch das Eintippen

einiger weiterer Daten vervollständigt. Die Anweisungen für das Erstellen einer Zeile bilden einen abgeschlossenen Programmteil, dieser Programmteil wird bei Erarbeitung jeder Zeile durchlaufen. Der Aufruf der gespeicherten Daten wird durch die Kennzahlen gesteuert, die Abfolge der Zeilen ist festgelegt durch die Reihenfolge, in der die Kennzahlen zu Beginn eingetippt wurden.

Die Erstellung einer Zeile beginnt mit dem Ausdrucken von Protokollnummer, Gewässer und Entnahmeort, bedarfsweise ist diese Zeile mit einem Hauptflußgebiet zu übertiteln. Die Überschrift wird dann ausgedruckt, wenn die Tabelle begonnen wird oder wenn die zu schreibende Zeile zu einem neuen Hauptflußgebiet gehört. Diese Entscheidung wird aufgrund der Zehnerstelle der Ortskennzahl getroffen. Die Ziffern 1 bis 5 sind den fünf Hauptflußgebieten, beginnend mit "I. Rheingebiet" bis zu "V. Draugebiet" zugeordnet. Je nach der Ziffer, welche die Zehnerstelle der Ortskennzahl darstellt, wird am Tabellenanfang oder im Fall eines Ziffernwechsels zur entsprechenden Stelle im Programm gesprungen und die richtige Überschrift ausgedruckt. Das Ende eines vorhergehenden Hauptflußgebietes kann durch einen Trennstrich, ohne Ausdruck einer neuen Überschrift, angedeutet werden; dies geschieht, falls als Zehnerstelle der Ortskennzahl eine der Ziffern von 6 bis 9 auftritt. Die Protokollnummer kann den gemeinsam gespeicherten Kennzahlen direkt entnommen werden und wird ausgedruckt. Gewässer und Entnahmeort werden ähnlich wie das Hauptflußgebiet - mit Hilfe der Ortskennzahl an der entsprechenden Stelle im Programm gefunden und gedruckt; liegen die Ziffern der Ortskennzahl nicht in dem für sie vorgesehenen Bereich, so wird der für Gewässer und Entnahmeort bestimmte Platz freigelassen.

Nachdem Protokollnummer, Gewässer und Entnahmeort gedruckt wurden, folgt das Eintippen einiger Daten, welche zur Proto-

kollnummer und damit zur aktuellen Zeile gehören. Es sind dies der Pegelstand in cm sowie Entnahmetag und Meßtag; diese Parameter werden nach dem Eintippen sofort ausgedruckt und nicht gespeichert. Weiters werden das Volumen der eingedampften Wasserprobe in Litern, die Masse des Eindampfrückstandes in mg und die flammenphotometrisch bestimmte Kaliumkonzentration der Wasserprobe in mg/l eingetippt. Diese Parameter werden zur Aktivitätsberechnung benötigt und daher so lange gespeichert, als dies zur Erstellung der aktuellen Zeile notwendig ist. Der Quotient aus Eindampfrückstand und eingedampftem Flüssigkeitsvolumen wird als Eindampfrückstand bezogen auf einen Liter ausgedruckt.

Die Berechnung der Aktivitätswerte erfolgt aufgrund oben angegebener Formeln. Der gleiche Aufbau der Formeln für Alpha- und Beta-Aktivität bzw. für ihre Fehler gestattet, daß die Berechnung dieser Werte mittels gemeinsam verwendbarer Unterprogramme durchgeführt wird. Die Aktivitätswerte werden gerundet bzw. im Fall eines negativen Vorzeichens Null gesetzt und ausgedruckt. Weiters wird bei den Alpha- und Beta-Aktivitätswerten überprüft, ob die Werte unterhalb der Toleranzgrenzen für Wasser liegen. Sollte eine Grenze überschritten werden, so wird der überschreitende Aktivitätswert gekennzeichnet und die Überschreitung für die Gesamtbeurteilung vorgemerkt. Damit ist jener Programmteil, welcher eine Zeile erstellt, abgeschlossen und die Tabelle kann Zeile um Zeile gedruckt werden.

Am Ende der Tabelle oder auch bei ihrer Unterbrechung besteht die Möglichkeit, zwei Fußnoten auszudrucken. Im Normalfall werden die Toleranzgrenzen durch die Meßwerte nicht überschritten worden sein; dies wird in der Beurteilung festgehalten. Der Sachbearbeiter wird angeführt und damit ist der Programmablauf beendet.

Die erarbeitete Tabelle siehe Anhang wird als Monatsbericht der radiologischen Überwachung der österreichischen Oberflächengewässer an die zuständigen Bundesministerien weitergeleitet. Die Veröffentlichung der Einzel- und Mittelwerte der Radioaktivität sowie der probenbezogenen Daten der überwachten Oberflächengewässer erfolgt seit 196o im Hydrographischen Jahrbuch und auch im Jahresbericht "Radioaktivitätsmessungen in Österreich" des Bundesministeriums für Gesundheit und Umweltschutz.

Literatur:

Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung (1982): Bestimmung der Radioaktivität, Bd.1, C 7.- Vlg.Chemie, Weinheim.

HABERER, K.(1969): Radionuklide im Wasser.- Vlg.G.Thieme KG, München.

MOSER, B.(1978): Strahlenschutzverordnung, 2.Auflage.- Manzsche Verlags- u.Universitätsbuchhandlung, Wien.

PLESCH, R.(1968): Methoden der Isotopenpraxis.- Hoppenstedt Wirtschaftsverlag GmbH, Darmstadt, Berlin, Hamburg, Wien.

TSCHURLOVITS, M., UNFRIED, E. (1975): Physikalische Methoden für die radiologische Umgebungsüberwachung von Kernanlagen.- Atomkernenergie, Bd.25, 1-18.

Anschrift der Verfasser: Manfred FRIEDRICH, Mag.Dr. Wilhelm KRONER, Bundesanstalt für Wassergüte, Schiffmühlenstraße 12O, Postfach 52, A-1223 W i e n

BUNDESANSTALT FUER WASSERGUETE
W i e n - Kaisermuehlen

M U S T E R

R a d i o a k t i v i t a e t
von Oberflaechenwaessern in Oesterreich
im FEBRUAR 1983

Pr.Nr. ../83	Hauptflussgebiet Gewaesser u. Entnahmeort	Pegel in cm	Entnahme-tag	Messtag	Eindampf-rueckstand mg/l	Gesamt-beta-Aktiv. ± 1.96 σ K - Aequivalent pCi/l +)	Kalium-aktivitaet pCi/l	Rest-beta-Aktiv. ± 1.96 σ K - Aequivalent pCi/l	Gesamt-alpha-Aktivitaet ± σ pCi/l x)
	I. Rheingebiet								
30	Rhein	Lustenau	485	2 9	2 18	256.5	1.1 ± .2	1.3	0	1.1 ± .2
38	Bodensee	Bregenz	83	2 11	2 25	265.0	1.8 ± .2	1.9	.0 ± .1	.1 ± .2
29	Ill	Gisingen	214	2 7	2 18	310.9	.9 ± .2	1.1	0	.7 ± .2
	II. Inngebiet mit Salzach								
42	Inn	Kirchbichl	115	2 13	2 25	232.3	2.0 ± .2	1.8	.2 ± .2	.1 ± .1
41	Salzach	Salzburg	372	2 15	2 25	263.4	1.8 ± .2	1.7	.1 ± .2	.8 ± .2
27	Inn	Schaerding	378	2 3	2 18	326.7	1.2 ± .2	1.4	0	.4 ± .2
	III. Donaugebiet								
39	Fuschlsee	Fuschl am See	95	2 15	2 25	287.2	1.1 ± .2	.7	.4 ± .2	.0 ± .2
23	Donau	Engelhartszell	476	2 1	2 18	343.5	2.3 ± .2	2.5	0	.4 ± .2
32	Donau	Wien-Reichsbruecke	200	2 15	2 25	419.5	2.6 ± .2	2.8	0	.7 ± .3
34	Donaukanal	Wien b.Gh. Winter	0	2 15	2 25	528.0	5.2 ± .3	5.1	.1 ± .3	.7 ± .4
24	Donau	Hainburg	413	2 4	2 18	347.4	2.3 ± .2	2.5	0	.0 ± .2
25	March	Angern	380	2 2	2 18	388.4	4.9 ± .3	4.7	.2 ± .3	1.2 ± .3
28	Leitha	Deutsch Brodersdf.	106	2 10	2 18	385.0	1.7 ± .2	1.9	0	.0 ± .2
	IV. Rabnitz, Raab, Mur								
40	Neusiedlersee	Neusiedl am See	170	2 14	2 25	1693.0	21.7 ± .8	20.8	.9 ± .8	0
26	Mur	Spielfeld	308	2 2	2 18	292.0	1.7 ± .2	1.9	0	0
	V. Draugebiet								
31	Drau	Neubruecke Gumisch	105	2 9	2 18	258.5	1.0 ± .2	1.2	0	.7 ± .2

+) Beta-Aktivitaetswerte ausschliesslich H-3
x) Eichung mit Natururan (Uranylazetat)

Beurteilung: Saemtliche Messwerte der Gesamt-beta- und auch der Gesamt-alpha-Aktivitaet lagen unterhalb der Toleranzkonzentration fuer Wasser.

ZOBODAT - www.zobodat.at

Zoologisch-Botanische Datenbank/Zoological-Botanical Database

Digitale Literatur/Digital Literature

Zeitschrift/Journal: Wasser und Abwasser

Jahr/Year: 1982

Band/Volume: 1982

Autor(en)/Author(s): diverse

Artikel/Article: Beiträge betreffend Einsatz von Kleinrechengeräten zur Datenauswertung auf dem Wassergütesektor 157-205