

Beiträge betreffend Einsatz von Kleinrechenge-
räten zur Datenauswertung auf dem Wassergütesektor

	Seite
<u>Einleitung</u>	158-159
<u>1. Mitteilung:</u> W. RODINGER Auswertung biologischer Meßdaten mit dem technisch-wissenschaftlichen Rechengert "DIEHL-ALPHATRONIC"	160-169
<u>2. Mitteilung:</u> L.J. OTTENDORFER Berechnung von Ausgleichskurven höherer Ordnung mit dem Taschenrechner "TI-59 Programmable"	170-186
<u>3. Mitteilung:</u> M. FRIEDRICH und L.J. OTTENDORFER Programm zur Berechnung des Massenabsorptions- koeffizienten der β^- -Strahlung mit TI-59	187-193
<u>4. Mitteilung:</u> M. FRIEDRICH und W. KRONER Meßwertverarbeitung in der radiologischen Über- wachung 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 Kleinrechnergeräte 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 Rechnergerät "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, worüber in 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 Leistungs-
klasse - 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 er-
hebliche Anzahl von Veröffentlichungen aus allerletzter
Zeit. Der Vorteil dieser handlichen Geräte ist wohl darin
zu sehen, daß sie wegen ihrer Handlichkeit und der Möglich-
keit des Einsatzes von zahlreichen auf Magnetkarten ge-
speicherten Rechenprogrammen auch ortsunabhängig verwendet
werden können.

Die nachfolgenden vier Mitteilungen befassen sich teils mit
speziellen Auswerteverfahren, teils mit allgemeinen Rechen-
gängen, 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 geräte-eigene 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 4160 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 diverse kleinere Rechen-

programme binnen kurzem erledigt.

Mit Hilfe des verdrahteten Statistik - ROMs werden oft Verteilungen von Werten auf ihre Gesetzmäßigkeit hin mit Regressionskurven höherer Ordnung 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 mehrdimensionaler linearer Regressionen 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 Berechnung von Mittelwerten, Standardabweichungen und Korrelationskoeffizienten mehrdimensionaler Daten. 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 Donauegelstände 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 $n \leq 20$) 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 Ausdrücke 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 Sonnenscheindauer sowie Angaben über Ausdehnung der Seeoberfläche und der mittleren Seetiefe via Tastatur der DIEHL-ALPHATRONIC eingegeben werden.

Meßergebnisse des Chlorophyllaufschlusses werden mittels Programm auf Chlorophyll 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 Ordinatenkala in eine Gerade überführt werden.

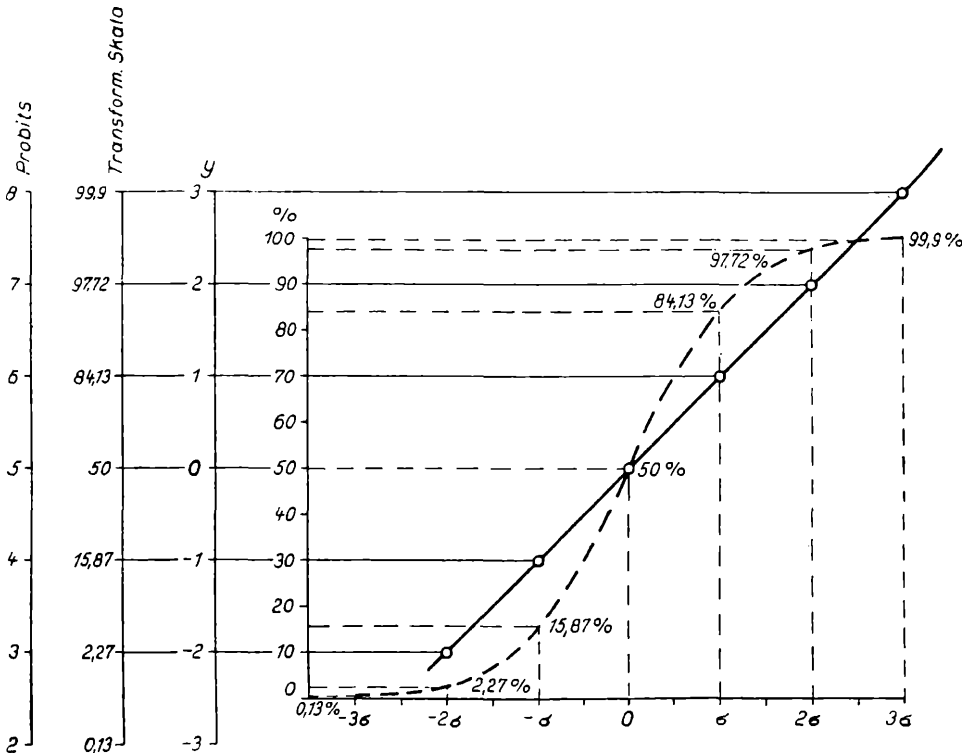
Neben der ursprünglichen linearen Prozentordinatenkala wird eine Senkrechte gezeichnet und der Nullpunkt bei 50 % angenommen. Die σ -Einteilung der Abszisse wird nun nach oben und unten hin aufgetragen; die Werte reichen von $+\infty$ bis $-\infty$ wie die σ -Werte selbst (y Skala). Neben die y-Achse 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. 50 % 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

$$y = (e \exp(0,4615(\ln\%)^3 - 5,2047(\ln\%)^2 + 20,3933(\ln\%) - 23,8577)) \cdot 0,027335 + 3,63325$$

ergibt näherungsweise errechnete Probitwerte, die im Bereich



Konstruktion der transformierten Ordinatenkala.

10 % bis 90 % den tabellarisch beschriebenen Probitwerten (WEBER, E., 1957) sehr ähnlich sind (Korrelationskoeffizient $r = 0,9998$).

Bei der Berechnung des LC_{50} - bzw. EC_{50} - 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_{50} bzw. die EC_{50} 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 $LC_{50} \pm s \cdot t / \sqrt{n}$ 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_{50} (EC_{50}) - Wert werden nach Beendigung des Rechenvorganges auf dem Streifen ausgedruckt dargestellt.

Beispielsweise wurden bei einem akuten Kurzzeittoxizitätstest folgende letale Reaktionen bei Fischen beobachtet:

Aquarium 1 % tote Fische	Aquarium 2	Konzentration der Substanz g/l
0	0	0,0
0	0	0,5
20	20	1
20	40	3
40	60	5
80	60	7
80	80	9
100	100	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
- LC₅₀-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 diene 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 $(x_i/Y_i(\text{gef.}))$, 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

$$a_0, a_1, \dots, a_N$$

für die folgende Funktion ermittelt werden:

$$y = f(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_N \cdot x^N \quad \text{-Gl.1-}$$

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

$$\sum [y_i - f(x)]^2 = \sum [y_i - a_0 - a_1 x - a_2 x^2 - a_N x^N]^2 = \min. \quad \text{-Gl.2-}$$

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_0 bis a_N partiell zu differenzieren, wobei man für ein Polynom N-ten Grades $N + 1$ lineare Bestimmungsgleichungen erhält:

$$\begin{aligned} a_0 \cdot n + a_1 \sum x^1 + a_2 \sum x^2 + \dots + a_N \sum x^N &= \sum y \\ a_0 \sum x^1 + a_1 \sum x^2 + a_2 \sum x^3 + \dots + a_N \sum x^{N+1} &= \sum y \cdot x^1 \\ a_0 \sum x^2 + a_1 \sum x^3 + a_2 \sum x^4 + \dots + a_N \sum x^{N+2} &= \sum y \cdot x^2 \end{aligned} \quad \text{-Gl.3-}$$

$$a_0 \sum x^N + a_1 \sum x^{N+1} + a_2 \sum x^{N+2} + \dots + a_N \sum x^{2N} = \sum y \cdot x^N$$

SCHÄRF und Mitarbeiter (1980) 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 $a_0 \dots a_N$, worauf sich jeder beliebige Wert der gesuchten Ausgleichsfunktion mittels des Softwareprogrammes ML-07 (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 (1980) für ein Rechenggerät 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 Rechanlage entsprechender Leistungsfähigkeit zu übertragen. Auch WAGNER (1980) 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 ungeradzahligem 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

$$y = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_N \cdot x^N$$

an die gegebenen Meßpunkte P_1

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

beschreibt, kann nach der folgenden allgemeinen Formel berechnet werden

$$r = \frac{\sum_{k=0}^{k=n} (a_k \sum y \cdot x^k) - \frac{1}{n} \cdot (\sum y)^2}{\sum y^2 - \frac{1}{n} \cdot (\sum y)^2} \quad - \text{Gl. 4}$$

$$0 \leq r \leq 1$$

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.

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

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:

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

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

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

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

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

mit

$$R = w + \frac{2}{3} v \cdot w + \frac{2 \cdot 4}{3 \cdot 5} v^2 \cdot w + \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \dots (f-3)}{3 \cdot 5 \cdot 7 \dots (f-2)} v^{\left(\frac{f-2}{2}\right)} \cdot w$$

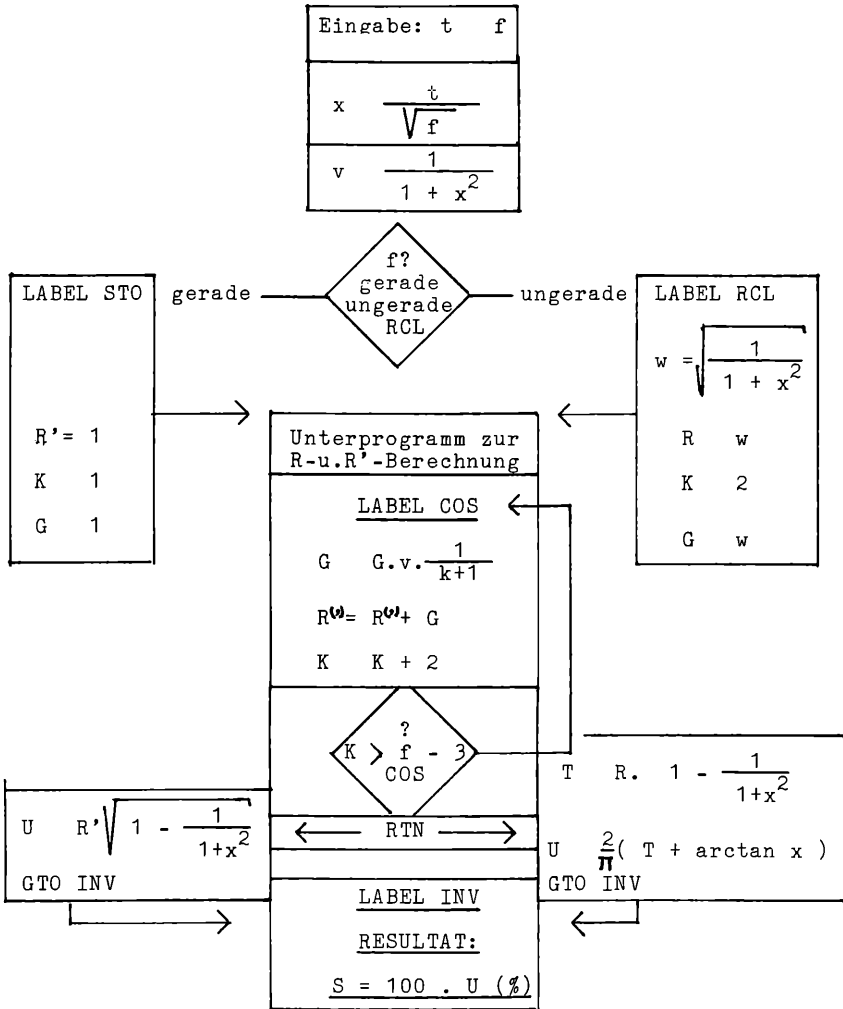
$$\text{wenn } f > 1: \quad S = 100 R' \sqrt{1-v} (\%) \\ (\text{gerade})$$

mit

$$R' = 1 + \frac{1}{2} v + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4} v^2 + \dots + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (f-3)}{2 \cdot 4 \cdot 6 \dots (f-2)} v^{\left(\frac{f-2}{2}\right)}$$

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_0, \dots, 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 $x_0 < \Delta x < x_E$.

Anweisung	Eingabe	Befehle	Anzeige	Print
1. Vorbereitung (Löschen)		E'	479.59	479.59
2. Wertpaare eingeben	x_i y_i	A B	x_i y_i	$x_i \cdot y_i$
3. Koeffizientenberechnung		R/S C; C; C;	A ; a_0 a_1 . a_n	A a_0 a_1 . a_n
4. Berechn.d.Korrelations- koeffizienten r		D	r	r
5. Prüfgröße TAU		B'		
6. Eingabe von x_E Eingabe von Δx	x_E Δx	C' D'	x_E Δx	x_E Δx
7. Einzelwerte $y_i = f(x_i)$ berechnen	x_i	C';E	$x_i \cdot y_i$	$x_i \cdot y_i$
8. y-Werte im Bereich $x_0 < x_i < x_E$ berechnen	x_0 x_i	E	y_0 y_i	y_0 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		
			<u>Resultat:</u> S(%)	S(%)
<u>Berechnung von t (TAU)</u>				
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
			<u>Resultat:</u> t (TAU)	t TAU

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

000	J	LBL	050	44	SUM	100	98	ADV	150	07	07
001	10	E*	051	3J	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
00J	58	FIX	055	09	09	105	76	LBL	155	14	D
006	06	6	056	44	SUM	106	43	RCL	156	53	(
007	69	DP	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	STD	062	13	13	112	95	=	162	40	40
013	06	06	063	44	SUM	113	42	STD	163	54	
014	91	R/S	064	16	16	114	38	38	164	42	STD
015	76	LBL	065	16	A*	115	43	RCL	165	43	43
016	16	A*	066	44	SUM	116	00	00	166	2J	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	.3	RCL
020	92	RTN	070	44	SUM	120	42	STD	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	.3	RCL
026	42	STD	076	15	15	126	69	DP	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	STD	079	44	SUM	129	36	36	179	33	33
030	30	36	080	21	21	130	43	RCL	180	85	+
031	42	STD	081	16	A*	131	25	CLR	181	43	RCL
032	07	07	082	44	SUM	132	30	PGM	182	07	07
033	69	DP	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	STD	186	85	+
037	99	PRT	087	44	SUM	137	04	04	187	43	RCL
038	32	X:T	088	23	23	138	05	J	188	08	08
039	99	PRT	089	25	CLR	139	42	STD	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	13
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	STD	147	69	DP	197	53	
048	34	34	098	40	40	148	20	20	198	13	RCL
049	1	A*	099	99	PRT	149	00	00	199	42	42

200	75	-	233	53	266	76	LBL
201	43	RCL	234	43	267	44	SUM
202	43	43	235	40	268	43	RCL
203	54		236	75	269	58	58
204	54		237	04	270	44	SUM
205	3		238	54	271	57	57
206	95	=	239	54	272	43	RCL
207	42	STD	240	34	273	57	57
208	44	44	241	95	274	92	RTN
209	98	ADV	242	99	275	76	LBL
210	99	PRT	243	91	276	42	STD
211	91	R/S	244	76	277	91	R/S
212	76	LBL	245	15	278	76	LBL
213	17	B'	246	42	279	18	C'
214	43	RCL	247	57	280	42	STD
215	44	44	248	36	281	59	59
216	33	X ²	249	07	282	99	PRT
217	42	STD	250	13	283	91	R/S
218	45	45	251	29	284	76	LBL
219	53		252	25	285	19	D'
220	53		253	43	286	42	STD
221	53		254	59	287	58	58
222	01		255	32	288	99	PRT
223	75		256	43	289	91	R/S
224	43	RCL	257	57			
225	45	45	258	95			
226	54		259	67			
227	55	+	260	42			
228	43	RCL	261	71			
229	45	45	262	44			
230	54		263	61			
231	35	1/X	264	15			
232	65		265	91			

Rechenprogramm zur Integration der t-Verteilung:

000		050	00	100	22	INV	04	04		
001		051	43	101	59	INT	34	FX		
002		052	00	102	29	CP	42	STD		
003	08	053	95	103	22	INV	05	05		
00	55	054	32	10	67	EQ	42	STD		
005	53	055	03	105	43	RCL	06	06		
006	43	RCL	056	06	106	76	LBL	42	STD	
007	08	08	057	05	107	42	STP	10	07	07
008	85	058	05	108	01			158		2
009	01	059	06	109	42	U		159		STD
010	54	060	01	110	06	06		160		
011	65	061	05	U	111	42	STD	161		
012	13	062	06	6	112	07	07	162		
013	U4	063	10	E4	113	42	STD	163		
014	65	064	98	ADV	114	08	08	164		
015	43	RCL	065	91	R/S	115	71	SBR	165	
016	06	06	066	76	LBL	116	30	CDS	166	
017	54	067	12	R	117	53		167		
018		SIU	068	32	118	53		168		
019		06	069	02	2	119	01	169		
020		SUM	070	01	1	120	75	170		
021		07	071	00	DP	121		171		
022	03	072	04	04	122			172		RCL
023	03	073	32	X/T	123			173		07
024	43	42	CTD	124				17		+
025	08	02	02	125				175		RCL
026	80	DP	126			RCL		176		03
027	02	06	127			07		177		INV
028	5		128					78		TAN
029			129			U		179		
030			130			09		180		
031			131			CTD		181		J2
032			132					182		55
033			133					183		
034			134					18		
035	J		135					185		U
036	43	RCL	136					07		00
037	02	02	137							CTD
	54		138							INV
	00	U09	139							LBL
	29	CP	000			40				C
041	22	INV	001	00		141				2
042	77	GE	002	95		142				
043		CDS	003	42		43				
		CTN	004	04	U4					
			005		RCL					
			006		02					
			007							
			008							
			009							

200	05	05	250	02	2	300	42	STD	350	03	
201	25	CLR	251	69	OP	301	17	17	351	07	
202	70	RAD	252	02	02	302	32	XIT	352	01	
203	43	RCL	253	03	3	303	02	2	353	03	
204	01	01	254	01		304	06	6	354	04	
205	22	INV	255	00		305	02	2	355	11	1
206	30	TAN	256	00		306	07	7	356		E'
207	65		257	01		307	00	0	357		ADV
208	02	2	258	06		308	00	0	350		R/S
209	00	0	259	04		309	03	3	359		LBL
210	00	0	260	00		310	01	1	360		E'
211	55		261	03		311	10	E'	361		OP
212	89		262	07		312	01	R/S	362		04
213	95		263	69	OP	313		LBL	363		XIT
214	32		264	03	03	314		E	364		OP
215	03	3	265	02	2	315		STD	365		06
216	06	6	266	00	0	316		18	366		CLR
217	05	5	267	04	4	317		IT	367		PTN
218	0J	5		02	2	318					
219	06	6		01	1	319		J			
220	01	1	270	07	7	320		E'			
221	05	5	271	03		321		RCL			
222	06	6	272	05	J	322		18			
223	10	E'	273	03	3	323		X2			
224	98	ADV	274		7	324		STD			
225	91	R/S	275			325		19	001		CDS
226	76	LBL	276		U4	326			046		INV
227	61	GTD	277		OP	327		RCL	067		D
228	25	CLR	278		05	328		19	107		STN
229	02	2	279		CLR	329					
230	04		280		RTN	330					
231			281			331					
232	U1		282			332					
233	03		283		U	333					U
234	07		284	16	16	334					D'
235	01		285	32	XIT	335					E'
236	07		286	09	OP	336					E'
237	02	2	287	00	00	337					
238	02	2	288	02	2	338					
239	69	OP	289	02	2	339					
240	01	01	290	03	3	340					
241	03	3	291	05	5	341					
242	05		292	00	0	342					
243	01		293	00	0	343		54			
244	03		294	03	3	344		54			
245	03		295	01	1	345		54			
246	07		296	10	E'	346		=			
247	02		297	91	R/S	347		STD			
248	04		298	71	LBL	348		20			
249	03		299		D'	349		XIT			

LABELS- :

Literatur

- CHRISTIAN, S.D., TUCKER, E.E. (1982): Least squares analysis with the micro computer. 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 Rechenggerät "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, z₀ 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 $a = \mu/\rho$ (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 β -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:

$$F = \frac{A}{A_0} = \frac{1 - e^{-ax}}{ax}$$

- F Selbstabsorptionsfaktor
- A gemessene Aktivitätsrate
- A_0 ... konstante Gesamtaktivität
- x Flächenmasse in mg/cm^2
- a μ/g ... Massenabsorptionskoeffizient in cm^2/mg

Berechnung:

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 $\pm a$ 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 20 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 mikro-
chemischen 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, Schiff-
mühlenstraße 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 Nahrungs- wertes a für den MAK	a	2nd C'	a ?MAK
4.	Eingabe d. Schrittweite Δa	Δa	2nd D'	Δa INTV
5.	Eingabe der Genauigkeit	n	2nd E'	10^{-n} FEHL
6.	Eingabe der Meßwerte: Flächenmasse mg/cm ² Aktivitätsrate cpm	X_i A_i	A B	X_i X A_i Y
	usw.			1.
7.	Programmstart	-	C	a in mg/cm ²

Programm:

001	LBL	061		122	71	SBR	183	87	IFF	244	32			
	X²	062		123	33	X²	184	01	01	245	06	6		
002		063	LBL	124	29	CP	185	32	X:T	246	04	4		
003		064	D'	125	55		186	43	RCL	247	03	3		
004		065	42	STD	126	43	RCL	187	05	05	248	00	0	
005	LI	066	11	11	127	08	08	188	42	STD	249	01	1	
006	.06	067	32	X:T	128	95	=	189	06	06	250	03	3	
007	RTN	068	02	2	129	72	ST*	190	86	STF	251	02	2	
008	LBL	069	04		130	01	01	191		01	252	06	6	
009	R'	070	03		131	69	DP	192		LBL	253	71	SBR	
010	CMS	071	01		132	31	31	193	22	INV	254	33	X²	
011	SBR	072	03		133	01	1	194	43	RCL	255	29	CP	
012	FX	073	07		134	44	SUM	195	09	09	256	69	DP	
013	CLR	074	04	4	135	07	07	196	42	STD	257	00	00	
014	R/S	075	02	2	136	43	RCL	197	07	07	258	43	RCL	
015	LBL	076	71	SBR	137	07	07	198	43	RCL	259	10	10	
016	FX	077	33	X²	138	42	STD	199	06	06	260	91	R/S	
017	R	078	91	R/S	139	09	09	200	55		261	76	LBL	
018	U9	079	76	LBL	140	99	PRT	201	24		262	25	CLR	
019	42	STD	080	10	E'	141	91	R/S	202	50		263	43	RCL
020	00	00	081	32	X:T	142	76	LBL	203	95	=	264	11	11
021	42	STD	082	01		143	13	C	204	42	STD	265	44	SUM
022	02	02	083	00		144	53		205	12	12	266	10	1
023	05	5	084	45		145	73	RC*	206	85	+	267	71	SBR
024	09	9	085	32	X:T	146	03	03	207	43	RCL	268	34	FX
025	42	STD	086	94		147	75		208	13	13	269	43	RCL
026	01	01	087	95	=	148	53		209	95	=	270	05	05
027	42	STD	088	42	STD	149	53		210	32	X:T	271	42	STD
028	03	03	089	14	14	150	01		211	00	0	272	06	06
029	92	RTN	090	32	X:T	151	75		212	67	EQ	273	25	CLR
030	91	R/S	091	02	2	152	53		213	23	LNx	274	42	STD
031	LBL	092	01	1	153	53		214	43	RCL	275	05	05	
032	1	B'	093	01		154	73	RC*	215	12	12	276	61	GTD
033	42	STD	094	07		155	02	02	216	42	STD	277	13	C
034	08	08	095	02	2	156	65		217	13	13	278	71	LBL
035	32	X:T	096	03	3	157	43	RCL	218	61	GTD	279		X:T
036	07		097	02	2	158	10	10	219	25	CLR	280		
037	07		098	07	7	159	54		220	76	LBL	281		
038	02	2	099	71	SBR	160	42	STD	221	23	LNx	282		
039	04	4	100	33	X²	161	04	04	222		RCL	283		
040	03		101	69	DP	162	94	+/-	223		11	284		
041	03		102	00	00	163	22	INV	224			285		
042	03		103	29	CP	164	23	LNx	225			286		
043	00		104	91	R/S	165			226					
044	71		105	76	LBL	166	04		227					
	33		106	11	R	167		+	228					
	1		107	72	ST*	168		RCL	229		STD			
	76	LBL	108	00	00	169		04	230		11			
	18	C'	109	32	X:T	170			231		1	I		
	42	GTD	110	04		171			232		X:T			
	10	10	11	04		172			233		RCL			
	32	X:T		71	SBR	173		=	234	14	14			
	07			33	X²	17		SUM	235	77	GE			
	01			69	DP			05	236		CE			
	03			30	30			DP	237		GTD			
	00				R/S			32	238		CL			
					LBL			DP	239		LBL	1		
				12	B			33	240		CE	221		
				32	T			DS2	241		GTD	240		
				04				07	242		RCL			
				05					243		10			

Label:

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 Wasser-
güte führt bereits seit dem Jahre 1960 im Auftrag des Bundes-
ministeriums für Land- und Forstwirtschaft monatliche Messun-
gen der Radioaktivität wichtiger österreichischer Seen und
Fließgewässer durch. Im österreichischen Strahlenschutzgesetz
vom 11. Juni 1969, § 37, wurde der Bundesanstalt für Wasser-
güte damals Bundesanstalt für Wasserbiologie und Abwasser-
forschung - der Auftrag erteilt, die großräumige Überwachung
und Überprüfung der Umwelt auf radioaktive Verunreinigungen
durchzuführen.

Zu den im Sinne o. a. Bundesgesetzes zählen, nach Hauptfluß-
gebieten geordnet, folgende Gewässer:

- I. Rheingebiet: Rhein (Lustenau), Bodensee (Bregenz),
Ill (Gisingen)
- II. Inngebiet: Inn (Kirchbichl), Salzach (Salzburg),
Inn (Schärding)
- III. Donaugebiet: Fuschlsee (Fuschl), Donau (Engel-
hartszell), Donau (Wien), Donau-
kanal (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 $1.10^{-7} \mu\text{Ci}/\text{cm}^3$ 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 Gesamt-beta 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 β -Kalibrierstandards verwendet, da sie das Nuklid K-40 im konstanten und genau bekannten natürlichen Isotopenverhältnis enthalten, ihre spezifische Aktivität für Low-Level-Messungen günstig liegt, die mittlere Beta-Energie etwa der des Spaltproduktgemisches entspricht, und K-40 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 Ip_m (Impuls/min) = 0,45 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 $0,4 \text{ mg/cm}^2$ Flächen-gewicht 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 Zähl-schälchen 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 Gesamt-beta-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 $A \pm \sigma$ zu erwarten. Angegeben wird mit $\pm 1,96 \sigma$ 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 Alphantronik 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 Zählchälchen 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 Gesamtpulszahl 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 1960 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 120, 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 Gewaeasser u. Entnahmeort	Pegel in cm	Entnahme- Messtag	Eindampf- rueckstand mg/l	+)		x)		
					Gesamt-beta-Aktiv. + 1.96 σ K - Aequivalent pCi/l	Kalium- aktivitaet + 1.96 σ K - Aequivalent pCi/l	Rest-beta-Aktiv. Gesamt-alpha- Aktivitaet + σ	Kalium- Aktivitaet + σ	
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. Inngbiet 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 Schaeerding	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 Engelhartzell	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. Wifiter	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 Kleinrechengegeräten zur Datenauswertung auf dem Wassergütesektor 157-205](#)