Statistische Betrachtungen zur Überprüfung der Einhaltung von Grenzwerten

Werner Timischl

1 Einleitung

Im Abwasserbereich existieren eine Vielzahl von Methoden (Verträglichkeitskriterien, criteria for compliance) zur Überprüfung der Einhaltung von Grenzwerten (emission standards). Eine Zusammenfassung verschiedener nationaler Kriterien und Standards findet man z.B in EWPCA (1990) oder bei Christensen (1991). Erwähnt seien in diesem Zusammenhang auch die in der EG-Richtlinie 91/271/EEC (1991) enthaltenen Kriterien und Standards. Ziel der folgenden Ausführungen ist es, die statistischen Aspekte bei der Anwendung von Kriterien und Standards näher darzulegen und auch die in den beiden zuerst genannten Publikationen enthaltenen vergleichenden Betrachtungen zu ergänzen.

2 Problemstellung

Es sei X die zu kontrollierende Beobachtungsgröße (z.B. die Gesamtphosphorkonzentration), von der angenommen wird, daß sie normalverteilt ist mit dem Mittelwert (wahren Wert) μ und der Varianz σ^2. Wiederholtes Messen von X (z.B. monatlich, also $n = 12$ mal) ergibt die Zufallsstichprobe $X_1, X_2, \ldots, X_n$ (jedes der X_i ist wie X verteilt). Mit den X_i bzw. damit gebildeten Stichprobenfunktionen wie z.B. dem Stichprobenmittel

$$\bar{X} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$$

oder der Stichprobenvarianz

$$S^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2$$

wird ein Kriterium

$$f(X_i, \bar{X}, S^2, \ldots) < K$$

formuliert, in dem K ein festgelegter Standard ist. Für eine konkrete Stichprobe $x_1, x_2, \ldots, x_n$ ist das Kriterium entweder erfüllt oder nicht. Im ersten Fall wird auf Einhaltung des vorgegebenen Grenzwertes entschieden, andernfalls nicht.

Wünschenswert ist nun, daß die Entscheidung mit hoher Sicherheit auf „Grenzwert eingehalten" lautet, wenn der Mittelwert μ, also der wahre Wert von X, unter einem kritischen Wert μ_g bleibt. Im folgenden sei unter μ_g stets die größte Zahl mit der Eigenschaft

$$P(f(X_i, \bar{X}, S^2, \ldots) < K | \mu \leq \mu_g) \geq 95\%$$

verstanden. (Unter der Voraussetzung $\mu \leq \mu_g$ ist das Kriterium mit zumindest 95%-iger Wahrscheinlichkeit erfüllt.) Durch diese Forderung wird also der Standard K des Kriteriums mit einem „Grenzwert" μ_g für den Mittelwert μ von X in Verbindung gebracht.

Ferner ist es wünschenswert, daß mit nur geringer Wahrscheinlichkeit eine Entscheidung auf „Grenzwert eingehalten" getroffen wird, wenn μ einen maximal tolerierbaren Wert μ_t, ($\mu_t > \mu_g$) überschreitet. Im folgenden sei μ_t als kleinste Zahl mit der Eigenschaft

$$P(f(X_i, \bar{X}, S^2, \ldots) < K | \mu \geq \mu_t) \leq 5\%$$

vereinbart. (Unter der Voraussetzung $\mu \geq \mu_t$ ist das Kriterium mit höchstens 5%-iger Wahrscheinlichkeit erfüllt.) Die zweite Forderung führt in Verbindung mit der ersten zur sogenannten kleinsten gesicherten Überschreitung $\Delta\mu = \mu_t - \mu_g$; erst wenn μ vom Grenzwert μ_g nach oben um mehr als $\Delta\mu$ abweicht, ist das verwendete Kriterium imstande, diese (mit einer Sicherheit von 95%) als Grenzwertüberschreitung auszuweisen.

Offensichtlich ist ein Kriterium umso schärfer, je kleiner die „kleinste gesicherte Überschreitung" $\Delta\mu$ ist. Diese stellt daher wie μ_g ein wichtiges Vergleichsmaß zwischen den in Anwendung befindlichen Kriterien dar. Beim Vergleich sind ferner Abhängigkeiten vom Stichprobenumfang n und der Standardabweichung σ zu berücksichtigen.

Im folgenden werden beispielhaft drei Kriterien diskutiert, nämlich

(1) $$\bar{X} < K,$$

(2) $$\bar{X} - cS < K \quad \text{und}$$

(3) mindestens $(n-k)$ der X_i sind kleiner als K.

Kriterium (1) ist z.B. nach der EG-Richtlinie bei der Kontrolle der Gesamtphosphorkonzentration anzuwenden. In Kriterium (2) sind c eine in geeigneter Weise zu bestimmende positive Konstante und S die Standardabweichung (Quadratwurzel aus der Stichprobenvarianz); dieses Kriterium wird z.B. in Dänemark verwendet. Kriterium (3) findet sich u.a. wieder in der EG-Richtlinie (Kontrolle von BSB, CSB). Es verlangt, daß zumindest $n-k$ der X_i den Standard K unterschreiten; dabei ist n der Stichprobenumfang und k ($k = 1, 2, \ldots, k_{max}$) in geeigneter Weise festzulegen. Der rechts stehende Standard K wird i.a. eine von der Wahl des Kriteriums abhängige Konstante sein.

3 Das Mittelwertkriterium (1)

3.1 Eigenschaften

Es sei $P = P(\bar{X} < K)$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Mittelwertkriterium erfüllt ist. Die Besonderheiten eines Kriteriums sind besonders gut aus einer graphischen Darstellung der Abhängigkeit der Wahrscheinlichkeit P vom Mittelwert μ zu erkennen. Im Hinblick auf Vergleiche zwischen den Kriterien ist es zweckmäßig, anstelle von μ einen anderen Lageparameter der Verteilung von X zu betrachten. Dieser durch θ bezeichnete neue Parameter drückt die Wahrscheinlichkeit dafür aus, daß X den jeweiligen Standard K erreicht bzw. überschreitet. Mit μ hängt θ über die Beziehung

(4) $$\frac{K-\mu}{\sigma} = \Phi^{-1}(1-\theta)$$

zusammen, in der Φ die Standardnormalverteilungsfunktion (und folglich Φ^{-1} die entsprechende Umkehrfunktion) darstellt. Abb. 1 zeigt die Abhängigkeit der Wahrscheinlichkeit P vom Parameter θ für zwei Stichprobenumfänge ($n = 12$ sowie $n = 6$). Aus der Zeichung sind unmittelbar die den Wahrscheinlichkeiten $P = 0.95$ und $P = 0.05$ zugeordneten Abszissenwerte θ_g bzw. θ_t abzulesen. Setzt man diese in (4) ein, lassen sich - bei gegebenem σ und K - die entsprechenden Werte μ_g und μ_t bestimmen und damit schließlich auch $\Delta\mu = \mu_t - \mu_g$. Wie die nachfolgenden Berechnungen zeigen, läß sich die kleinste gesicherte Überschreitung $\Delta\mu$ auch direkt mit der Formel

$$\frac{\Delta\mu}{\sigma} = \frac{3.3}{\sqrt{n}}$$

bestimmen. Durch Auflösen nach n erhält man daraus die Formel

$$n = \left(\frac{3.3\sigma}{\Delta\mu}\right)^2,$$

die den notwendigen Stichprobenumfang liefert, um – mit dem Mittelwertkriterium – eine kritische Grenzwertüberschreitung $\Delta\mu$ mit hoher Wahrscheinlichkeit (nämlich 95%) zu entdecken. In diesem Sinne ist z.B. zur Aufdeckung einer Überschreitung im Ausmaß der Standardabweichung ($\Delta\mu = \sigma$) ein Stichprobenumfang von zumindest $n = 11$ notwendig.

In Abb. 2 ist der Zusammenhang zwischen dem Standard K und dem Grenzwert μ_g in Abhängigkeit von der Standardabweichung σ dargestellt. Bei festem Grenzwert μ_g für den Mittelwert von X ist der Standard K umso größer anzusetzen, je größer die Fehlervarianz ist. Die genauen Zusammenhänge sind dem nächsten Abschnitt zu entnehmen.

3.2 Statistische Berechnungen

Unter den getroffenen Voraussetzungen ist das Stichprobenmittel $\bar{X}$ normalverteilt mit demselben Mittelwert μ wie X, jedoch der um den Faktor $1/n$ veränderten Varianz σ^2/n. Daher ist $(\bar{X} - \mu)\sqrt{n}/\sigma$ standardnormalverteilt. Die Wahrscheinlichkeit P läßt sich mit Hilfe der Standardnormalverteilung Φ durch

$$P = P(\bar{X} < K) = \Phi\left(\frac{K - \mu}{\sigma}\sqrt{n}\right)$$

ausdrücken. Wegen

$$(5) \qquad \theta = P(X \geq K) = 1 - P(X < K) = 1 - \Phi\left(\frac{K - \mu}{\sigma}\right)$$

und der daraus folgenden Formel (4) ergibt sich schließlich

$$P(\bar{X} < K) = \Phi[\Phi^{-1}(1 - \theta)\sqrt{n}].$$

Zur Bestimmung von μ_g und $\Delta\mu$ sind die Gleichungen $P(\bar{X} < K) = 0.95$ bzw. $P(\bar{X} < K) = 0.05$ aufzulösen. Mit dem 95%-Quantil $z_{0.95} = 1.65$ der Standardnormalverteilung erhält man zunächst

$$(6) \qquad \theta_g = 1 - \Phi(z_{0.95}/\sqrt{n}) \quad \text{und} \quad \theta_t = \Phi(z_{0.95}/\sqrt{n}).$$

In Verbindung mit (4) ergibt sich daraus

$$(7) \qquad \frac{\mu_g}{\sigma} = \frac{K}{\sigma} - \Phi^{-1}(1 - \theta_g)$$

sowie

$$\frac{\Delta\mu}{\sigma} = \frac{\mu_t - \mu_g}{\sigma} = \frac{2z_{0.95}}{\sqrt{n}} = \frac{3.3}{\sqrt{n}}.$$

Für den Zusammenhang zwischen μ_g und K folgt aus (7) und (6) die Formel

$$\frac{\mu_g}{K} = \frac{1}{1 + V\Phi^{-1}(1 - \theta_g)} = \frac{1}{1 + V z_{0.95}/\sqrt{n}},$$

in der $V = \sigma/\mu_g$ die auf den Grenzwert μ_g bezogene Standardabweichung σ bezeichnet.

4 Das Mittelwert-Streuungskriterium (2)

4.1 Eigenschaften

Nun bezeichnet $P = P(\bar{X} - cS < K)$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß Kriterium (2) erfüllt ist. Die Konstante c wird so festgelegt, daß der Standard K mit dem Grenzwert μ_g übereinstimmt. Diese Forderung bedingt, daß c vom Stichprobenumfang n abhängig wird. Die Abhängigkeit ist in Abb. 3 dargestellt; sie läßt sich, wie noch gezeigt wird, durch die Formel

$$(8) \qquad c = c_n = \sqrt{\frac{5.41(n-1)}{(2n - 4.71)n}}$$

ausdrücken. Für die Wahrscheinlichkeit $\theta = P(X \geq K)$ gilt wieder Formel (4); speziell ist also $\mu = K$ für $\theta = 0.5$.

Abb. 4 zeigt für $n = 12$ und $n = 6$, wie P mit wachsendem θ fällt. Auf Grund der besonderen Wahl von $c = c_n$ gehört nun zu $P = 0.95$ der von n unabhängige Wert $\theta_g = 0.5$. Wie man mit dem zu $P = 0.05$ gehörenden Abszissenwert θ_t die kleinste gesicherte Überschreitung

$$(9) \qquad \Delta\mu = 2c_n\sigma$$

findet, ist weiter unten ersichtlich. Aus (9) und (8) kann man den notwendigen Stichprobenumfang berechnen, um eine vorgegebene kritische Grenzwertüberschreitung $\Delta\mu$ mit hoher Wahrscheinlichkeit (nämlich 95%) zu entdecken. Zur Aufdeckung einer Überschreitung im Ausmaß der Standardabweichung ($\Delta\mu = \sigma$) ist mit dem Mittelwert-Streuungskriterium ein Stichprobenumfang von zumindest $n = 12$ notwendig.

4.2 Statistische Berechnungen

Vorausgesetzt wird, daß X normalverteilt ist mit dem Mittelwert μ und der Varianz σ^2. Dann kann – in erster Näherung – auch angenommen werden, daß die im Kriterium auftretende Zufallsvariable $Y = \bar{X} - c_n S$ normalverteilt ist mit dem Mittelwert $\mu_Y = \mu - c_n\sigma$ und der Varianz

$$\sigma_Y^2 = \sigma^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{c_n}{2(n-1)} \right).$$

Es folgt, daß die Wahrscheinlichkeit P mit Hilfe der Standardnormalverteilungsfunktion Φ und unter Beachtung von (4) durch

$$(10) \quad P = P(\bar{X} - c_n S < K) = \Phi\left(\frac{K - \mu_Y}{\sigma_Y} \right) = \Phi\left(\frac{\Phi^{-1}(1-\theta) + c_n}{\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{c_n^2}{2(n-1)}}} \right)$$

ausgedrückt werden kann. Hier ist c_n noch so festzulegen, daß $P = 0.95$ für $\theta = 0.5$ wird; diese Forderung führt zunächst auf

$$\Phi\left(\frac{c_n}{\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{c_n^2}{2(n-1)}}} \right) = 0.95,$$

woraus man

$$(11) \quad \frac{c_n}{\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{c_n^2}{2(n-1)}}} = z_{0.95} = 1.65$$

erhält und schließlich durch Auflösen nach c_n Formel (8).

Bei der Herleitung der Formel (9) ist zuerst zu beachten, daß

$$(12) \quad \frac{\Delta\mu}{\sigma} = \frac{\mu_t - \mu_g}{\sigma} = \frac{\mu_t - K}{\sigma} = -\Phi^{-1}(1 - \theta_t)$$

gilt. Für den ganz rechts stehenden Ausdruck erhält man, wenn man in (10) $P = 0.05$ setzt und umformt und schließlich Gl. (11) beachtet,

$$(13) \qquad -\Phi^{-1}(1-\theta_t) = c_n + z_{0.95}\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{c_n^2}{2(n-1)}} = 2c_n.$$

Aus (12) und (13) folgt unmittelbar Formel (9).

5 Das Anteilskriterium (3)

5.1 Eigenschaften

In Abb. 5 ist die Wahrscheinlichkeit P dafür, daß Kriterium (3) erfüllt ist, d.h. mindestens $(n-k)$ der X_i kleiner als der Standard K sind, in Abhängigkeit vom Parameter θ für den Fall $n = 5$, $k = 1$ („4 von 5"-Regel) sowie für den Fall $n = 12$, $k = 2$ („10 von 12"-Regel) dargestellt. Mit den aus der Zeichnung entnommenen oder berechneten (vgl. den nächsten Abschnitt) Werten θ_g und θ_t ergibt sich die kleinste gesicherte Überschreitung (95%) aus der Formel

$$(14) \qquad \frac{\Delta\mu}{\sigma} = \frac{\mu_t - \mu_g}{\sigma} = \Phi^{-1}(1-\theta_g) - \Phi^{-1}(1-\theta_t).$$

Z.B. ist im Sonderfall der „4 von 5"-Regel $\theta_g = 0.0771$ und $\theta_t = 0.6574$. Die mit der „4 von 5"-Regel aufdeckbare kleinste gesicherte (95%) Überschreitung ist gleich dem 1.83-fachen der Standardabweichung σ; für den Zusammenhang zwischen μ_g und K folgt mit der Abkürzung $V = \sigma/\mu_g$ analog zum Mittelwertkriterium

$$\frac{\mu_g}{K} = \frac{1}{1 + V\Phi^{-1}(1-\theta_g)} = \frac{1}{1 + 1.43V}.$$

Bei der Anwendung des Anteilskriteriums (vgl. z.B. die eingangs zitierte EG-Richtlinie) wird k i.a. als die kleinste natürliche Zahl mit der Eigenschaft festgesetzt, daß $P \geq 95\%$ für $(K-\mu)/\sigma = z_{0.95}$ (d.h. $\theta = 0.05$) gilt. (Durch diese Forderung ist sicher gestellt, daß stets $\mu_g \geq K - z_{0.95}\sigma$ bleibt.) Es folgt, daß $k = 1$ für $4 \leq n \leq 7$ zu wählen ist, $k = 2$ für $8 \leq n \leq 16$, $k = 3$ für $17 \leq n \leq 28$ usw.

5.2 Statistische Berechnungen

Die Grundlage für alle Berechnungen stellt wieder die explizite Formel für P dar. Kriterium (3) ist erfüllt, wenn mindestens $n-k$ der n Beobachtungen ein Ergebnis unter K liefert. Gleichbedeutend damit ist, daß höchstens k Ergebnisse den Standard erreichen bzw. übertreffen. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein einzelnes Ergebnis K erreicht bzw. übertrifft, wird aber gerade durch den in Formel (5) eingeführten Parameter θ ausgedrückt. Mit Hilfe der Bionomialverteilung (Anzahl der Wiederholungen n, Erfolgswahrscheinlichkeit θ) findet man sofort

$$P = \sum_{i=0}^{k} \binom{n}{k} \theta^i (1-\theta)^{n-i}.$$

Speziell ist z.B. im Falle der „4 von 5“-Regel mit $n = 5$ und $k = 1$

$$P = (1-\theta)^5 + 5\theta(1-\theta)^4.$$

Indem man einmal $P = 0.95$ und dann $P = 0.05$ setzt, erhält man die Bestimmungsgleichungen für θ_g bzw. θ_t mit den oben angegebenen Lösungen. Als kleinste gesicherte Überschreitung folgt aus (14)

$$\frac{\Delta\mu}{\sigma} = \Phi^{-1}(0.9229) - \Phi^{-1}(0.34369) = 1.425 + 0.405 = 1.83.$$

6 Zusammenfassung

Die Abb. 6 bis 8 enthalten jeweils gemeinsame Darstellungen aller behandelten Kriterien. Zunächst zeigt Abb. 6, daß beträchtliche Unterschiede bezüglich der Lage der P-Kurven entlang der θ-Achse bestehen. Das bedeutet z.B., daß ein für alle Kriterien gemeinsam festgelegter Standard K zu ganz verschiedenen Grenzwerten μ_g für den Mittelwert der Beobachtungsgröße X führen würde. Diesen Umstand bringt auch Abb. 7 zum Ausdruck; mit zunehmender Sreuung der Meßgröße divergieren beim Mittelwertkriterium der Standard K und der Grenzwert μ_g immer mehr. Die Divergenz ist noch größer beim Anteilskriterium. Beim Mittelwert-Streuungskriterium dagegen bleibt stets $K = \mu_g$. Eine auf den ersten Blick schwer zu ersehende Verschiedenartigkeit der Kriterien offenbart Abb. 8, in der die kleinste gesicherte Überschreitung (also jene, die das Kriterium mit einer Sicherheit von 95% aufdeckt) in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang dargestellt ist. Demnach wird – bei gleichem Stichprobenumfang – am ehesten eine Überschreitung mit dem Mittelwertkriterium entdeckt. Ab $n = 12$ sind allerdings die Kriterien (1) und (2) in dieser Hinsicht praktisch gleich, das Anteilskriterium bleibt aber auch bei größerem n deutlich schlechter.

Literatur

Christensen, H.W.: Principles of Data Evaluation in European Wastewater Control - Comparisons and Consequences (preprint).

EWPCA (European Water Pollution Control Association): Effluent Standards, Sampling and Compliance. Report on a workshop. Cambridge 1990.

Anschrift des Verfassers:
Univ.Doz.Dr.Werner Timischl
Technische Universität Wien
Wiedner Hauptstr. 8-10/1183, A-1040 Wien

Abb. 1: P-Kurven (Mittelwertkriterium)

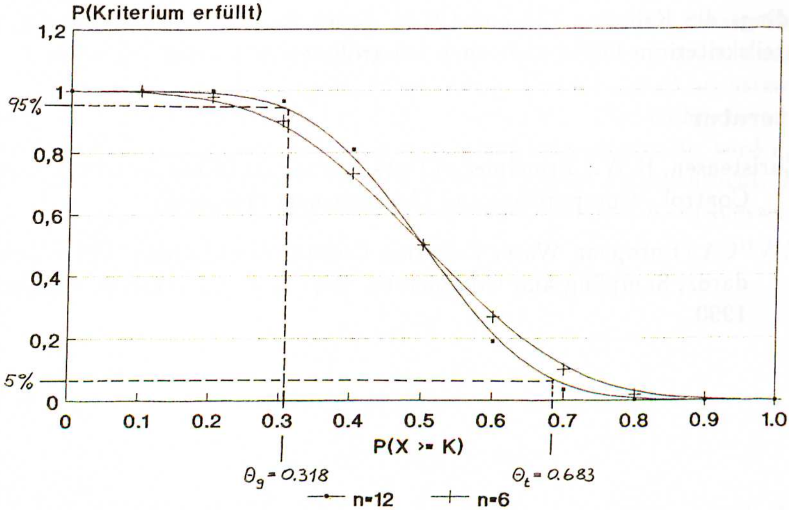

Abb. 2: Zusammenhang zwischen Standard K und Grenzwert μ_g (Mittelwertkriterium)

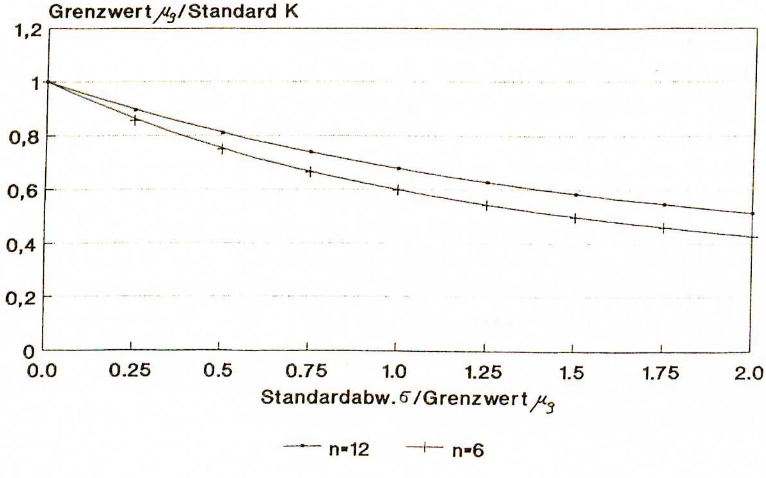

Abb. 3: Konstante c in Abhängigkeit
vom Stichprobenumfang n
(Mittelw.-Streuungs-Krit.)

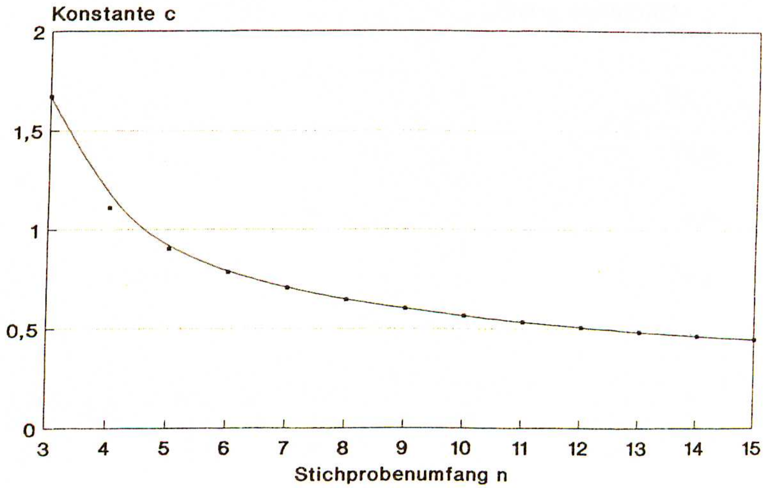

Abb. 4: P-Kurven
(Mittelw.-Streuungskrit.)

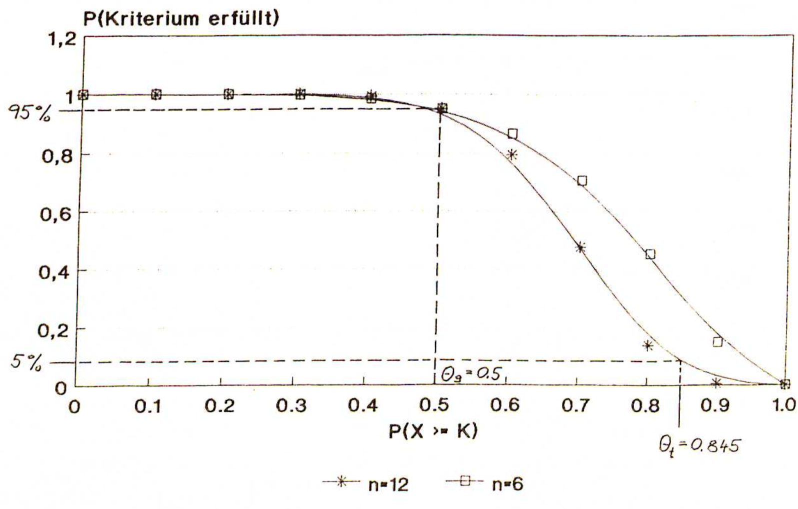

Abb. 5: P-Kurven (Anteilskriterium)

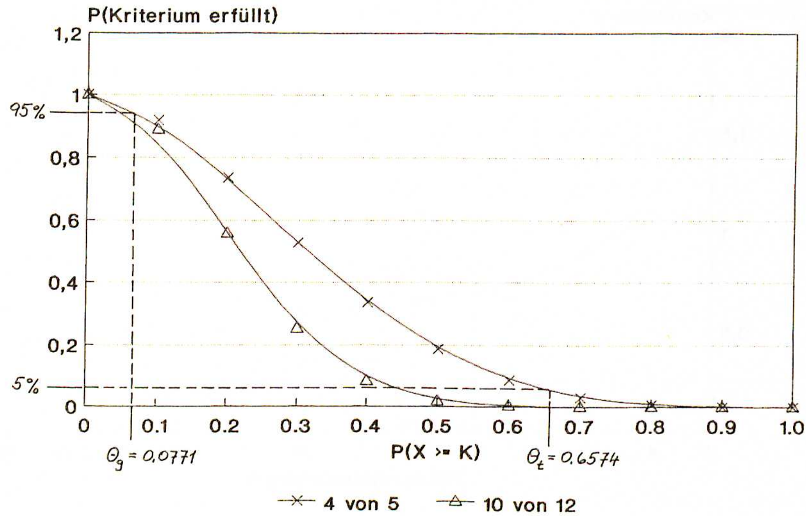

Abb. 6: P-Kurven (alle Kriterien)

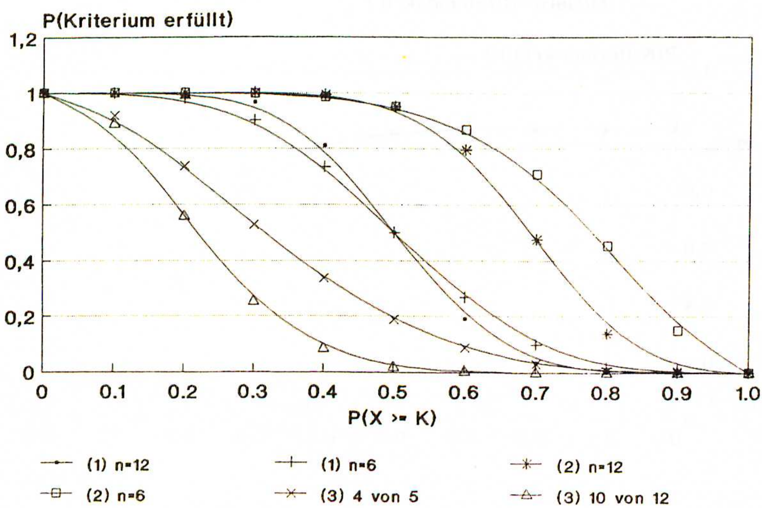

Abb. 7: Zusammenhang zwischen Standard K und Grenzwert μ_g (alle Kriterien)

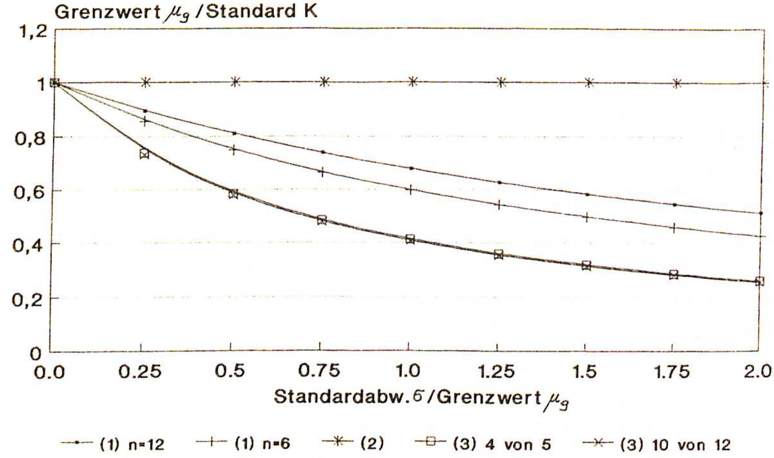

Abb. 8: Kleinste gesicherte Überschr. (alle Kriterien)