

Protocols voor de verwerking van data afkomstig uit routinematig onderzoek

WQSTAT, een statistisch pakket voor verwerking van waterkwaliteitsgegevens

Inleiding

Er wordt in ons land veel routinematig onderzoek van oppervlaktewater verricht. Alle regionale waterkwaliteitsbeheerders onderhouden een meetnet en ook in de rijkswateren verricht Rijkswaterstaat op routinebasis veel onderzoek. Veelal worden op een groot aantal plaatsen in het beheersgebied maandelijks monsters genomen, die op een groot aantal variabelen worden onderzocht.



IR. R. H. AALDERINK
Landbouwniversiteit
Wageningen
Vakgroep Natuurbeheer
Sectie Waterkwaliteitsbeheer

De kosten, die met deze inspanning gepaard gaan, zijn niet gering. Vaak wordt een belangrijk deel van de analysecapaciteit van de regionale waterkwaliteitsbeheerders besteed aan de analyse van monsters, genomen in het kader van routinematig onderzoek.

Als resultaat van alle inspanningen ontstaat een grote hoeveelheid data, die in de meeste gevallen verwerkt wordt in jaarverslagen en periodieke overzichten en zo een beeld geeft van de actuele toestand van de waterkwaliteit. Het is echter de vraag of de beschikbare gegevens wel altijd zo optimaal mogelijk worden gebruikt en of de verrichte meetinspanningen wel die informatie opleveren, die nodig is voor het nemen van de juiste beslissingen in het beheer en beleid.

De oorzaak van de discrepantie tussen de informatiebehoefte en de informatie, die wordt verkregen uit de gegevens, kan vaak worden gevonden in een slecht ontwerp van het meetnet of door het gebrek aan geschikte statistische technieken. Eigenlijk moet men bij het ontwerp van het meetnet uitgaan van de informatie die nodig is voor het beheer en beleid. In dit artikel wordt een systematische benadering gegeven voor het ontwerp of de evaluatie van een meetnet en wordt een overzicht gegeven van een aantal technieken die bruikbaar zijn voor de analyse van waterkwaliteitsgegevens, verzameld in het kader van routinematig onderzoek. Deze statistische technieken, gepresenteerd in de vorm van data-analyse protocols, zijn van belang voor het verwerken van gegevens en spelen ook een belangrijke rol bij de opzet of evaluatie van een meetnet. Ter illustratie wordt een aantal technieken

Samenvatting

Bij het ontwerp van een nieuw of de evaluatie van een bestaand meetnet speelt de keuze van een geschikte methode voor de statistische verwerking van de gegevens een belangrijke rol. Om de gewenste informatie uit de verzamelde gegevens te verkrijgen is het, naast het kwantificeren van de doelstellingen van het meetnet, noodzakelijk uit de veelheid aan bestaande statistische toetsen er één te kiezen, waarmee de geformuleerde hypothese kan worden getoetst. De keuze van een geschikte methode hangt samen met een aantal algemene karakteristieken van de gegevens. In dit artikel wordt een aantal protocols besproken, waarbij op grond van de algemene karakteristieken een verantwoorde keuze voor een methode kan worden gemaakt. Data-analyse protocols voor normoverschrijding, trendanalyse en het vergelijken van datasets worden gepresenteerd.

toegepast op chlorofylgegevens van het Naardermeer. Voor een verdere toepassing van de data-analyse protocols, wordt verwezen naar Koelmans [Koelmans, 1992] en Aalderink [Aalderink e.a., 1991].

Systematische aanpak

Een systematische benadering voor het ontwerp van een meetnet wordt onder andere gegeven door Ward [Ward, 1990]. Hij beschouwd een meetnet als een informatiesysteem, waarmee bedoeld wordt dat het bij het verkrijgen van informatie gaat om meer dan alleen het verzamelen van gegevens. Afb. 1 geeft de vijf stappen, die men in het ideale geval zou moeten doorlopen bij het ontwerpen van een meetnet.

Eén van de belangrijkste stappen in het ontwerp is het bepalen van de informatiebehoefte. De vraag die hierbij moet worden beantwoord luidt: waarom moet er worden gemeten en welke informatie moeten deze inspanningen opleveren? Uitgaande van de bestaande doel-

stellingen voor de waterkwaliteit moeten doelstellingen voor het meetnet worden geformuleerd. Vervolgens moet het antwoord van deze vraag worden vertaald in een statistische hypothese en kan een geschikte methode worden gekozen voor het toetsen van de hypothese. Een voorbeeld van een nadere uitwerking van STAP 1 wordt gegeven in afb. 2. Ook op basis van andere beleids- of beheersdoelstellingen kan STAP 1 verder worden uitgewerkt. Andere voorbeelden van doelstellingen voor een meetnet zijn onder andere: het toetsen aan normen en het volgen van de waterkwaliteit na het nemen van maatregelen.

In de volgende stap moet worden onderzocht of voldaan wordt aan de aannamen, die ten grondslag liggen aan de statistische methode. Er moet worden nagegaan of de statistische hypothese met behulp van de gekozen methode en de straks verzamelde gegevens kan worden getoetst. Hiervoor is het nodig op voorhand enig inzicht in de algemene karakteristieken van de gegevens te hebben. Om welke eigen-

Afb. 1 - Systematische benadering bij het ontwerp van een meetnet

STAP 1 DEFINITIE VAN DE INFORMATIEBEHOEFTE

- bepaal waterkwaliteitsdoelstelling
- bepaal de doelstelling van het meetnet
- kies statistische techniek
- relateer statistische conclusie aan de waterkwaliteitsdoelstelling

STAP 2 VERIFIËREN VAN STATISTISCHE ONTWERPCRITERIA

- bepaal de algemene karakteristieken van de gegevens
- verifieer de aannamen voor de gebruikte statistische methodes

STAP 3 ONTWERP VAN HET MEETNET

- bepaal de dichtheid van het meetnet en kies de monsterlocaties
- bepaal de monsterfrequentie op basis van de gekozen statistische technieken
- kies de variabelen waarop de monster geanalyseerd moeten worden

STAP 4 KEUZE EN DEFINITIE VAN PROCEDURES

- voor monsternamen, conservering en analyse
- voor verificatie en opslag van gegevens
- statistische analyse van de gegevens

STAP 5 RAPPORTAGE

- keuze van de vorm en frequentie van rapportage
- verspreiding van de rapporten
- toetsen van de informatie aan de doelstellingen van het meetnet
- gebruik van de informatie ten behoeve van beheer en beleid

Waterkwaliteitsdoelstelling:	Handhaven van de huidige waterkwaliteit, voortvloeiend uit het 'Stand-still beginsel'
Doelstelling meetnet:	Trenddetectie
Statistische methode:	Lineaire regressie van waterkwaliteitsvariabelen tegen de tijd
Statistische hypothese:	Helling van de regressielijn is gelijk aan 0 bij een betrouwbaarheid van 95%

Afb. 2 - Definitie van de informatiebehoefte

schappen van de dataset het gaat en hoe deze kunnen worden bepaald, wordt later in het artikel verder uiteengezet. Bij de evaluatie van een bestaand meetnet kan men uiteraard gebruik maken van historische gegevens om de algemene karakteristieken vast te stellen. Bij het ontwerp van een nieuw meetnet zijn vaak geen historische data beschikbaar en zal gebruik gemaakt moeten worden van informatie afkomstig van vergelijkbare systemen.

In STAP 3 wordt vervolgens het eigenlijke meetnet ontworpen. De monsterlokaties en hiermee samenhangend de dichtheid van het net worden gekozen en er wordt vastgesteld welke waterkwaliteitsgegevens van belang zijn. Zowel de keuze van de lokaties als de te onderzoeken variabelen hangen uiteraard nauw samen met de geformuleerde waterkwaliteitsdoelstelling. De frequentie van monsternamen wordt vooral bepaald door specifieke eigenschappen van de gegevens en de gekozen statistische methode. Voor het bepalen van de minimale frequentie voor het toetsen van hypothesen worden in de literatuur verschillende methoden beschreven [Lettenmaier 1976, Loftis e.a. 1980, Schilperoord 1983]. De minimale frequentie hangt samen met de gewenste betrouwbaarheid, de variantie in de data, de autocorrelatie en bij trenddetectie van de grootte van de waar te nemen trend. Andere aspecten die een rol spelen bij het ontwerp zijn uiteraard ook logistieke, juridische, capacitaire (monsternamen en laboratorium) en historische aspecten. Zo worden bijvoorbeeld in het 'Besluit kwaliteitsdoelstellingen en metingen oppervlaktewateren' [Staatsblad, 1983] eisen gesteld aan de minimale bemonsteringsfrequentie van oppervlaktewateren waaraan een specifieke functie is toegekend. Verder blijkt het vaak moeilijk om een lokatie, waar al langjarig routinematig onderzoek wordt verricht uit het monsterprogramma te schrappen.

Bij STAP 4 moet gedacht worden aan voorschriften voor monsternamen, conservering en analyse, zoals die uitvoerig worden weergegeven in de vele NEN-voorschriften. Daarnaast gaat het

ook om de opslag en verwerking van de gegevens. Ook hier moeten keuzen gemaakt worden in het gebruik van software en hardware. De meeste waterkwaliteitsbeheerders gebruiken hiervoor een eigen systeem, hoewel er een tendens tot uniformering is. Zijn er duidelijke voorschriften voor de hierboven genoemde onderdelen van STAP 4, anders is dat voor de statistische analyse van de gegevens. Behalve voor het toetsen aan normoverschrijding, zoals gegeven in het 'Besluit kwaliteitsdoelstellingen oppervlaktewateren' [Staatsblad 1983] zijn er geen voorschriften voor de statistische verwerking van gegevens. Wel worden er door de werkgroep V van de CUWVO enige aanbevelingen gedaan voor de detectie van trends [CUWVO, 1984].

De laatste stap, waar het gaat om de rapportage, verspreiding en het gebruik van de informatie, spreekt min of meer voor zichzelf. STAP 5 laat ook zien dat het ontwerp van een meetnet een iteratief proces is. In deze stap moet de uiteindelijk verkregen informatie getoetst worden aan de doelstelling van het meetnet. Dit kan eventueel leiden tot bijstellingen in de voorafgaande stappen.

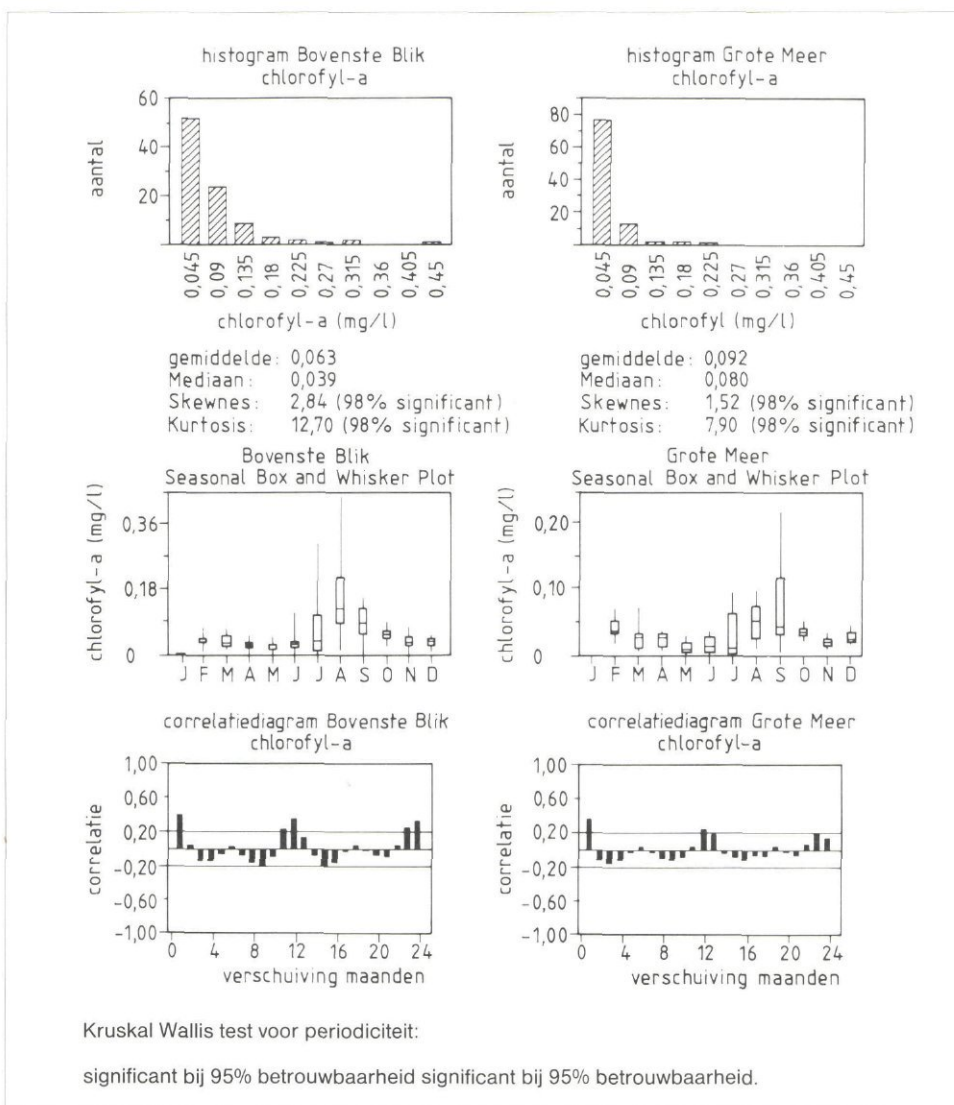
Algemene karakteristieken van de gegevens

Uit het bovenstaande blijkt dat de keuze van de statistische methode een belangrijke stap is in de systematische opzet van een meetnet. Alvorens te komen tot keuze van een statistische test is het noodzakelijk enige algemene karakteristieken van de data te onderzoeken. Op deze wijze kan worden nagegaan of voldaan wordt aan de vooronderstellingen die aan veel statistische toetsen ten grondslag liggen en kan een verantwoorde methode worden gekozen.

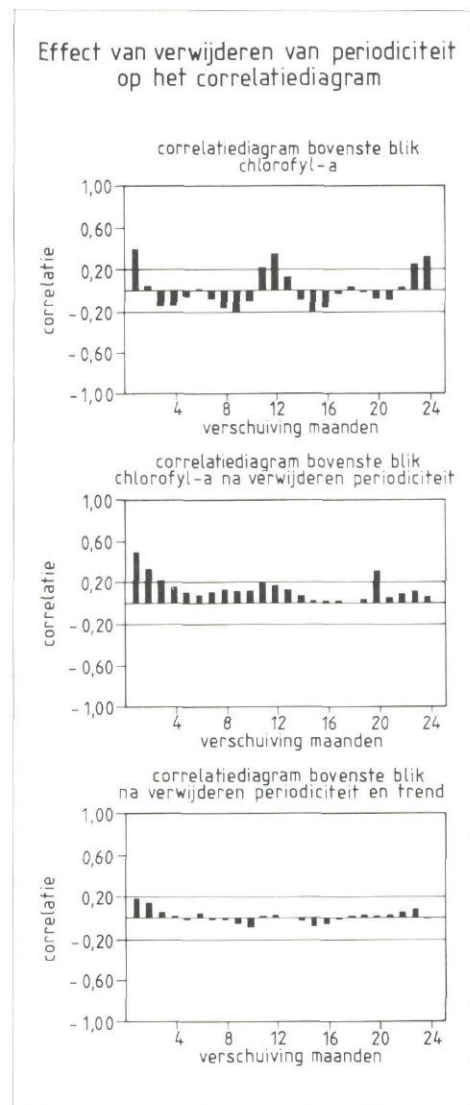
Veel statistische methoden gaan uit van een bekende onderliggende frequentieverdeling, meestal afgeleid van de normale verdeling. Bij het gebruik van dergelijke methoden wordt aangenomen dat de gegevens normaal verdeeld zijn. Een eerste indruk van de frequentieverdeling van de gegevens kan op eenvoudige wijze worden verkregen door

het maken van een histogram (zie afb. 3). Is de verdeling symmetrisch en heeft deze de voor normaal verdeelde data karakteristieke klokvorm, dan zouden de data normaal verdeeld kunnen zijn. Veelal zijn de gevonden frequentieverdelingen echter niet symmetrisch, maar vertonen zij naar rechts een lange staart, omdat de extreem hoge waarden minder vaak voorkomen. Een tweetal grootheden, die informatie geven over de vorm van de verdeling, zijn de scheefheid en de kurtosis (zie afb. 3). Een significante positieve of negatieve scheefheid geeft aan dat de verdeling niet symmetrisch is. Een significante waarde voor de kurtosis geeft aan dat de verdeling geen echte piek rond het gemiddelde vertoont, zoals dat bij een normale verdeling verwacht mag worden. Ook kan gekeken worden naar het gemiddelde en de mediaan van de gegevens. Vallen deze niet samen, dan duidt dit ook op een niet-symmetrische verdeling (zie afb. 3). Uiteraard zijn er ook allerlei statistische toetsen waarmee de normaliteit van data kan worden getoetst. In veel commercieel verkrijgbare statistische software vind men toetsen als de W test [Shapiro en Wilk, 1965] en de D test [D'Agostino, 1971]. In de meeste gevallen zal men tot de conclusie komen dat de data niet normaal verdeeld zijn. In dat geval verdient het aanbeveling gebruik te maken van distributievrije methoden. Een voordeel van distributievrije methoden is overigens dat deze vrij ongevoelig zijn voor uitschieters en zogenaamde non-detects.

De onderlinge onafhankelijkheid van de gegevens is een andere voorwaarde, die gesteld wordt bij toepassing van statistische methoden. Ook aan deze eis wordt meestal als het gaat om waterkwaliteitsgegevens niet voldaan. Waterkwaliteitsgegevens vertonen vaak een significante autocorrelatie. Deze kan worden veroorzaakt door periodiciteit, of door het voorkomen van een trend. Periodiciteit zal door seizoensinvloeden uiteraard veelvuldig voorkomen. Als eerste analyse is het maken van een Box and Whisker Plot van maandgegevens vaak illustratief om periodiciteit herkennen (zie afb. 3). In een dergelijke grafiek worden voor de hele dataset per maand de mediaan, het maximum, het minimum en de 25 en 75% percentiel waarden weergegeven. Periodiciteit is ook terug te vinden in een zogenaamd correlatiediagram (zie afb. 3). Een dergelijk diagram ontstaat door de dataset te verschuiven in de tijd en voor elke verschuiving de correlatie tussen de originele data en de verschoven set te



Afb. 3 - Algemene karakteristieken chlorofyl-a gegevens Naardermeer.



Afb. 4.

berekenen. Op deze wijze ontstaat een diagram, dat de correlatie tussen de gegevens als functie van de verschuiving weergeeft. Karakteristiek voor het optreden van periodiciteit in waterkwaliteitsgegevens, verzameld met frequentie van eens per maand, is het cyclische verloop met positieve correlaties die optreden bij een verschuiving van 12 en 24 maanden en de negatieve correlaties bij een verschuiving van ca. 6 en 18 maanden. Een formele test voor periodiciteit is de Kruskal-Wallis test [Gilbert, 1987].

Eventueel optredende periodiciteit kan worden verwijderd, met behulp van technieken uit de tijdserie-analyse. Het kan echter ook vrij eenvoudig door van elke afzonderlijke waarneming het maandgemiddelde (over de hele periode) af te trekken. Afb 4. toont het effect van het verwijderen van periodiciteit op het correlatiediagram. Zoals blijkt is de

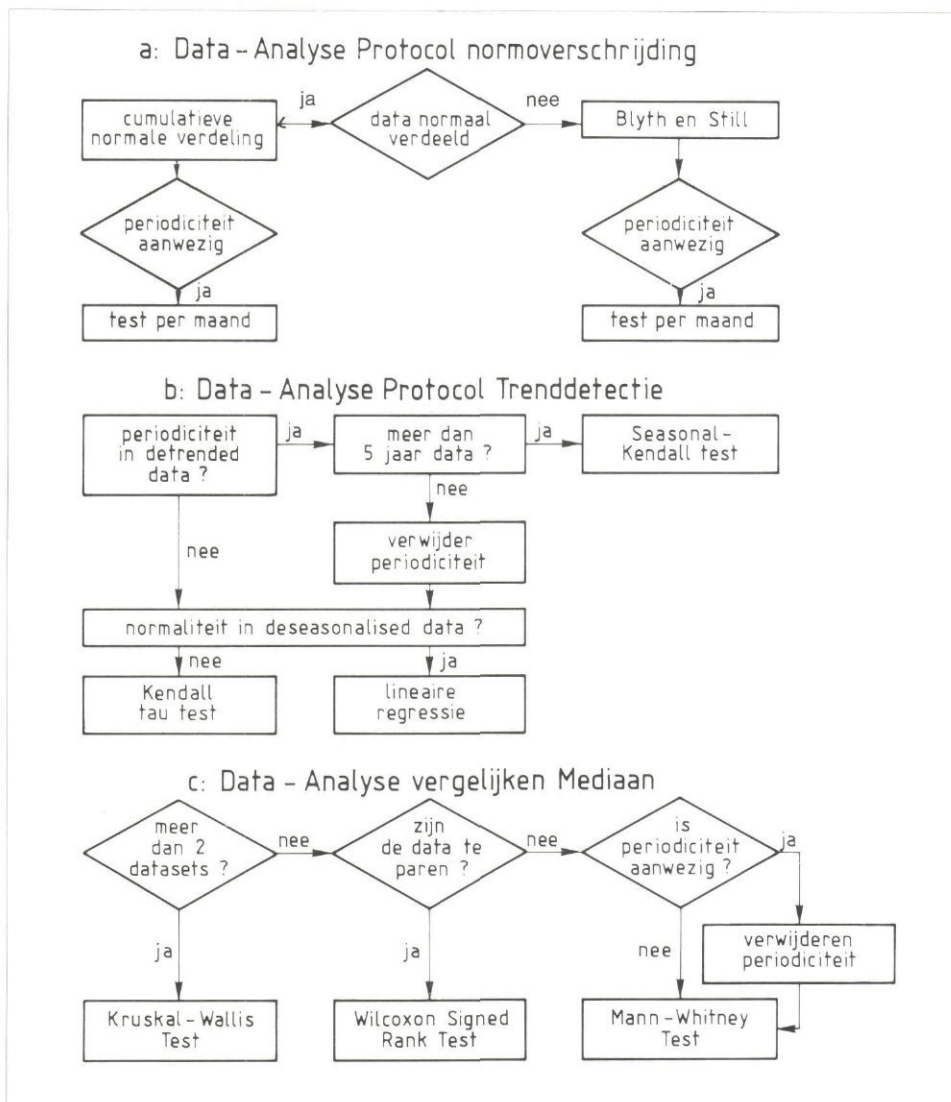
autocorrelatie voor een belangrijk deel verdwenen, althans de voor de seizoensinvloed karakteristieke correlaties. De resterende autocorrelatie wordt veroorzaakt door het optreden van een trend in de data. Dit leidt tot een geleidelijk afnemende waarde van de autocorrelatiecoëfficiënt met de verschuiving. Overigens wordt deze pas goed zichtbaar na het verwijderen van de periodiciteit. Ook een aanwezige trend kan op eenvoudige wijze worden verwijderd (zie afb. 4). Het blijkt dat in dit geval na verwijderen van de periodiciteit en de trend geen significante autocorrelatie meer in de data aanwezig is. Dit hoeft niet altijd het geval te zijn. Naast periodiciteit en het voorkomen van trends, kunnen er andere processen zijn die seriële correlatie veroorzaken.

Data-analyse protocols

Zijn de algemene statistische karakteristieken van de gegevens bekend, dan kan een geschikte statistische methode worden

gekozen voor het uitvoeren van de test. Op basis van mogelijke uitgangspunten van het beleid en beheer, worden een drietal data-analyse protocols beschreven. Deze protocols moeten worden gezien als voorschriften voor een statistisch verantwoord verwerking van de gegevens en zijn in zekere zin vergelijkbaar met voorschriften voor de chemische analyse van watermonsters.

Er worden voorschriften besproken voor normoverschrijding, trenddetectie en het vergelijken van datasets. Is men geïnteresseerd in een geleidelijke verandering in de waterkwaliteit, dan is trendanalyse de meest geëigende methode. Gaat het echter om het volgen van het effect van een maatregel, dan kan het vergelijken van de mediaan een zinvolle methode zijn. In dit geval kan men het vóórkomen van een stapvormige trend detecteren, door de mediane waarde van de gegevens voor en na de ingreep te bepalen. Ook is het



Afb. 5 - Data-Analyse Protocols voor normoverschrijding, trenddetectie en vergelijken van datasets.

mogelijk door vergelijking van mediane waarden de waterkwaliteit in een aantal verschillende systemen onderling te vergelijken, bijvoorbeeld met een referentiesituatie.

Normoverschrijding

Voor het toetsen van normoverschrijding kan het belangrijk zijn na te gaan hoe vaak de norm wordt overschreden. Voor normaal verdeelde gegevens kan op eenvoudige wijze met behulp van de cumulatieve normale verdeling voor een bepaalde betrouwbaarheid de fractie van het aantal waarnemingen dat de norm overschrijdt, worden bepaald (zie bijv. [Gilbert, 1987]). Voor niet normaal verdeelde variabelen, moet een distributievrije methode worden toegepast. Een distributievrije methode voor het bepalen van het aantal overschrijdingen en het daarbij behorende betrouwbaarheidsinterval wordt gegeven door Blyth en Still [Blyth en Still, 1983].

Een voorwaarde voor deze methode is dat de gegevens onderling onafhankelijk zijn. Wordt de onderlinge correlatie voornamelijk bepaald door periodiciteit in de gegevens, dan verdient het aanbeveling om het aantal overschrijdingen per periode (bijvoorbeeld per maand) uit te drukken. Het data-analyse protocol, voor

het toetsen van normoverschrijding wordt weergegeven in afb. 5a. In afb. 6a worden ter illustratie de resultaten van de Blyth en Still toets weergegeven voor de chlorofyl-gegevens van het Naardermeer. Er is getoetst aan een norm van 0,1 mg/l. De resultaten zijn zowel per maand als voor de totale dataset weergegeven. Uit de resultaten blijkt dat vooral in de Bovenste Blik in de zomermaanden de norm van chlorofyl wordt overschreden. Zo geldt voor augustus dat 60% van de waarnemingen in die maand niet voldoet aan de norm. Het betrouwbaarheidsinterval geeft aan dat bij een betrouwbaarheid van 95%, de werkelijke fractie overschrijdingen voor de maand augustus ligt tussen 0,29 en 0,85.

Trendanalyse

Er zijn verschillende methoden voor trendanalyse. Deze methoden kunnen worden onderverdeeld in methoden die gebaseerd zijn op regressie-analyse, waarbij wordt uitgegaan van normaal verdeelde data, en zogenaamde distributievrije methoden. Voor deze laatste genoemde methode is het niet noodzakelijk dat de data normaal verdeeld zijn. Een veel toegepaste distributievrije methode voor trendanalyse is de Kendall Tau test [Gilbert, 1987]. Ook voor trenddetectie is het van belang dat de gegevens onderling onafhankelijk zijn. De aanwezigheid van periodiciteit betekent dat aan deze aanname niet wordt voldaan. In dat geval kan eventuele periodiciteit eerst worden verwijderd, of kan gebruik gemaakt worden van de zogenaamde Seasonal Kendall test [Gilbert, 1987]. Deze test houdt intern rekening met het optreden van periodiciteit. De Seasonal Kendall test werkt goed, wanneer meer dan 5 jaar gegevens aanwezig zijn, bij een monsterfrequentie van eens per maand. Zijn minder gegevens beschikbaar dan verdient het de voorkeur de Kendall Tau test toe te passen, waarbij eerst de periodiciteit wordt verwijderd. In afb. 5b

Afb. 6a - Normoverschrijding Chlorofyl-a (0,1 mg/l) voor de Bovenste Blik en het Grote meer.

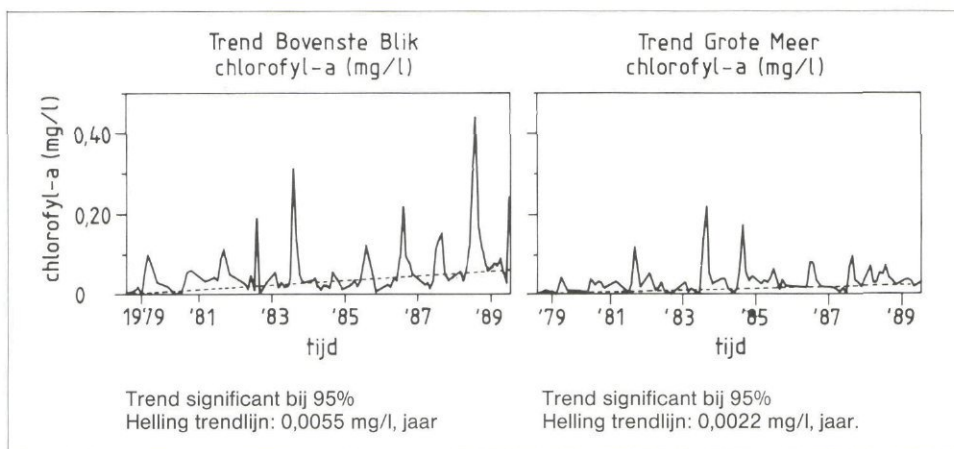
Maand	Bovenste Blik		Grote Meer	
	Fractie	95% BI	Fractie	95% BI
januari	0		0	
februari	0		0	
maart	0		0	
april	0		0	
mei	0		0	
juni	0,09	0,00-0,40	0	
juli	0,27	0,08-0,60	0	
augustus	0,60	0,29-0,85	0,10	0,01-0,44
september	0,40	0,15-0,70	0,30	0,09-0,62
oktober	0,14	0,01-0,55	0	
november	0		0	
december	0		0	
jaar	0,16	0,09-0,25	0,04	0,00-0,11

wordt het data-analyse protocol voor trendanalyse schematisch weergegeven. Wederom is ter illustratie het voorschrift toegepast op de chlorofylgegevens van het Naardermeer (zie afb. 6b). Op grond van de algemene karakteristieken is gebruik gemaakt van de Seasonal Kendall test. De resultaten laten zien dat zowel voor de Bovenste Blick als voor het Grote Meer met een betrouwbaarheid van 95% een significante positieve trend wordt gevonden. De gevonden helling van de trendlijn is 0,0055 mg/l, jaar voor de Bovenste Blick en 0,0022 mg/l, jaar voor het Grote Meer.

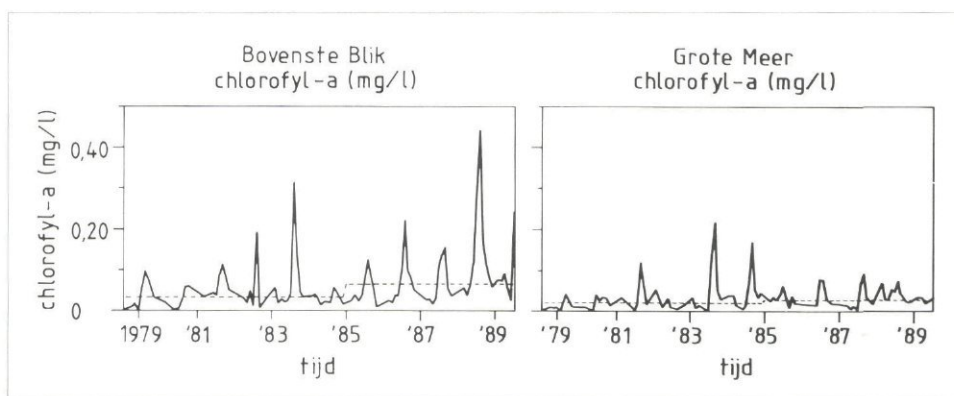
Vergelijken van datasets

Ook voor het onderling vergelijken van datasets zijn verschillende methoden beschikbaar. Voor niet normaal verdeelde gegevens worden distributievrije methoden voor het vergelijken van de mediaan veel toegepast. Men kan de mediane waarden, van datasets, verzameld op verschillende lokaties, onderling vergelijken. Het is echter ook mogelijk de mediaan voor verschillende perioden in één tijdserie met elkaar te vergelijken. In afb. 5c wordt een aantal methoden genoemd. De keuze van de meest geschikte methode hangt in dit geval af van het aantal datasets. Gaat het om gegevens van slechts twee lokaties en zijn de data te paren, dan is een eenvoudige tekentoets als de Wilcoxon Signed Rank Test een geschikte methode. Met eventueel optredende periodiciteit in de data wordt bij deze test automatisch rekening gehouden. Zijn er meer dan twee datasets die moeten worden vergeleken, dan kan de Kruskal-Wallis test worden gebruikt. Ook deze test houdt direct rekening met het optreden van periodiciteit. Voor het vergelijken van twee datasets van ongelijke lengte, bijvoorbeeld twee periodes uit dezelfde tijdserie kan de Mann-Witney test worden toegepast. Voor deze test moet eventueel optredende periodiciteit worden verwijderd.

In afb. 6d worden de Bovenste Blick en het Grote Meer met elkaar vergeleken met behulp van de Wilcoxon Signed Rank Test. Uit deze test blijkt dat de mediaan van chlorofyl voor de data van de Bovenste Blick significant hoger is. Het verschil in waterkwaliteit tussen beide delen van het Naardermeer moet worden toegeschreven aan hydrologische situatie [Schot e.a. 1989]. Vooral de Bovenste Blick wordt nogal beïnvloed door nutriëntrijke kwel vanuit het Gooi, terwijl in het Grote Meer vooral infiltratie plaatsvindt. Vanaf 1985 wordt het Naardermeer gesuppleerd met gedefosfateerd IJmeer-



Afb. 6b- Trend chlorofyl-a Bovenste Blick en Grote Meer.

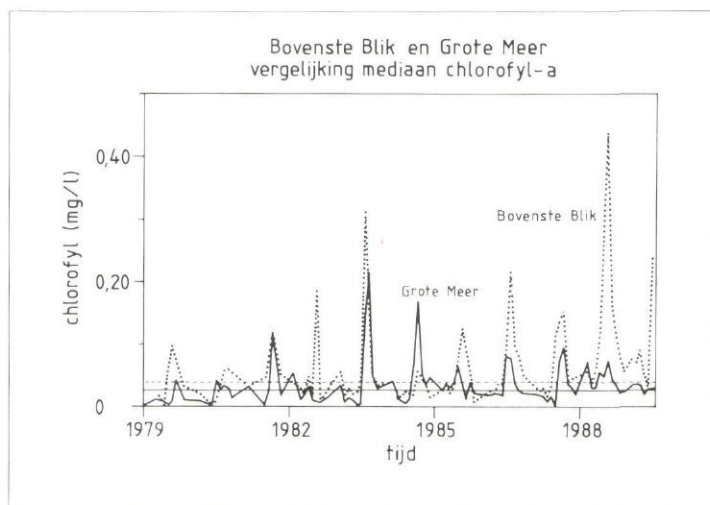


Afb. 6c - Mediaan chlorofyl-a Bovenste Blick en Grote Meer voor en na 1985.

water. In dit verband is het interessant na te gaan of deze maatregel effect heeft gehad op het chlorofylgehalte. Hiertoe zijn de mediane waarden van de periode voor en na suppletie met elkaar vergeleken met behulp van de Mann-Witney test, waarbij de periodiciteit werd verwijderd (zie afb. 6c). Hieruit blijkt voor het Grote Meer, dat direct wordt beïnvloed door de suppletie van gedefosfateerd water, geen significant verschil in mediaan te worden gevonden, terwijl voor de Bovenste Blick,

waarvoor verwacht mag worden dat die door de geïsoleerde ligging nauwelijks wordt beïnvloed door de suppletie nog een significante toename in de mediane waarde van het chlorofylgehalte wordt gevonden. Dit bleek ook al uit de trendanalyse, waarbij voor de Bovenste Blick een hogere positieve helling van de trendlijn werd gevonden.

• Slot op pagina 473



Afb. 6d - Mediaan chlorofyl-a Bovenste Blick en Grote Meer.