

Verhouding PM10-FDMS / PM10-ruwe data

De verhouding tussen de resultaten voor “PM10-FDMS” en “PM10-ruwe data” wordt op drie verschillende manieren bepaald:

- helling van de rechte door de oorsprong, berekend volgens een gewogen orthogonale regressie
- de verhouding van de gemiddelde waarden uit beide meetreeksen
- de gemiddelde waarde van de per dag berekende verhouding tussen beide meetwaarden

1 - Gewogen Orthogonale Regressie – Rechte door de Oorsprong

De verhouding van de resultaten van beide meetmethoden kan berekend worden via een lineaire regressie. Vermits er meetfouten optreden voor beide methoden wordt er geopteerd voor de orthogonale regressie. Om de invloed van toevallige sterk afwijkende meetpunten te onderdrukken worden wegingsfactoren ingevoerd. Er wordt ook geopteerd voor een rechte door de oorsprong. Dit laatste is vanuit statistisch oogpunt niet zo evident, maar deze eerder pragmatische keuze werd gemaakt omwille van enkele praktische redenen:

- er wordt één vaste factor gezocht voor de verhouding tussen beide methoden
- de onzekerheid op de metingen neemt toe in het gebied rond de detectielimiet
- logischer wijze zou het resultaat “nul” moeten zijn voor beide methoden indien het resultaat “nul” is voor één der methoden

De keuze van het type regressie (*klassiek lineaire* of *orthogonale* regressie) en de berekening van de wegingsfactoren wordt uiteengezet in “*Application of linear regressions to the comparison of analytical procedures for the determination of SO₂ in ambient air*”, P. Vanderstraeten et alii, *The Science of the Total Environment*, 71 (1988) 201-208.

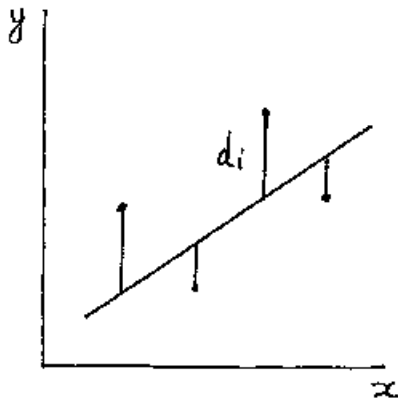
De keuze van het type regressie, de berekeningswijze van de wegingsfactoren en het schema van de iteratieve regressieberekening worden weergegeven in figuur 1. De formules voor de berekening van de parameters van de rechte (en hun variantie) worden weergegeven in de figuren 2 en 3. In figuur 2 worden de formules weergegeven voor de berekening van een rechte door de oorsprong ($Y = b.X$) en in figuur 3 deze van toepassing voor een rechte die niet door de oorsprong gaat ($Y = a + b.X$). De resultaten vermeld in deze bijlage betreffen een rechte door de oorsprong, berekend volgens de gewogen orthogonale regressie (formules rechts in figuur 2).

In een eerste stap worden, op basis van de gekozen regressietechniek (klassieke lineaire regressie of orthogonale regressie), de parameters en hun varianties berekend volgens een niet gewogen regressie (alle $w_i = 1$). Vervolgens worden de afstanden van de meetpunten (d_i) tot deze rechte berekend. Op basis van een gemiddelde afstand (D^2) worden de wegingsfactoren berekend en genormaliseerd zodat de som van de wegingsfactoren = n (aantal meetpunten).

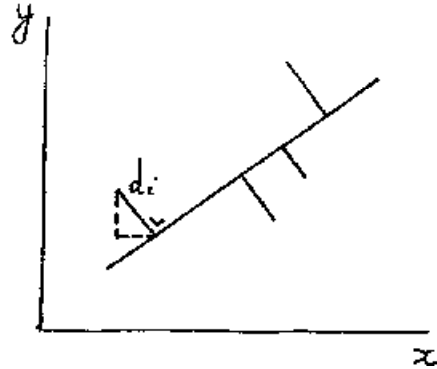
In een derde stap wordt een nieuwe set parameters (a, b) berekend volgens de gewogen regressie. Op basis van deze nieuwe parameters worden de afstanden van de meetpunten tot de nieuwe rechte berekend, alsook een nieuwe set wegingsfactoren en een nieuwe regressierechte, etc. ... totdat er voldoende convergentie is bereikt.

$$\sigma_{y_i}^2 \gg b^2 \sigma_{x_i}^2$$

$$\sigma_{y_i}^2 \cong b^2 \sigma_{x_i}^2$$



Least Squares



Orthogonal Regression

weighting factors

① $SS = \sum d_i^2 = \text{Minimum} \rightarrow (a, b)$

② $w_i ?$

$$D^2 = \frac{\sum d_i^2}{n} \rightarrow w'_i = \frac{D^2}{D^2 + d_i^2}$$

$$k = \frac{n}{\sum w'_i} \rightarrow w_i = k w'_i$$

③ $WSS = \sum w_i \cdot d_i^2 = \text{Minimum} \rightarrow (a, b)$

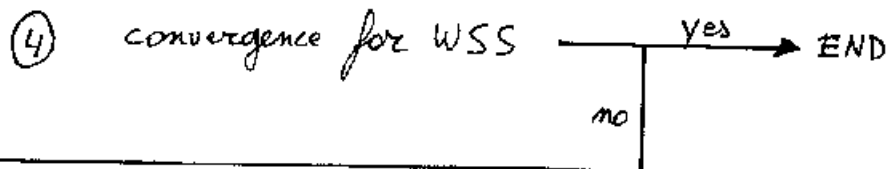


Fig. 1 : Berekeningswijze van de wegingsfactoren (w_i) en schema voor de iteratieve berekening van de regressierechte

$$Y = b X$$

Least Squares

$$b = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}$$

$$\sigma_b^2 = \sum \sigma_{y_i}^2 \left(\frac{\partial b}{\partial y_i} \right)^2$$

Orthogonal Regression

$$b = \frac{-(S_{xx} - S_{yy}) + \sqrt{(S_{xx} - S_{yy})^2 + 4 \cdot S_{xy}^2}}{2 \cdot S_{xy}}$$

$$\sigma_b^2 = \sum \left\{ \sigma_{y_i}^2 \left(\frac{\partial b}{\partial y_i} \right)^2 + \sigma_{x_i}^2 \left(\frac{\partial b}{\partial x_i} \right)^2 + 2 \sigma_{x_i y_i} \left(\frac{\partial b}{\partial x_i} \right) \left(\frac{\partial b}{\partial y_i} \right) \right\}$$

$$S_{xx} = \sum w_i \cdot x_i^2$$

$$S_{yy} = \sum w_i \cdot y_i^2$$

$$S_{xy} = \sum w_i \cdot x_i \cdot y_i$$

Fig. 2 : Formules ter berekening van de regressierechte door de oorsprong [$Y = b \cdot X$]

$$Y = a + b \cdot X$$

Least Squares

$$b = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}$$

$$a = \bar{y} - b\bar{x}$$

$$\sigma_b^2 = \sum \sigma_{y_i}^2 \left(\frac{\partial b}{\partial y_i} \right)^2$$

$$\sigma_a^2 = \sum \sigma_{y_i}^2 \left(\frac{\partial a}{\partial y_i} \right)^2$$

Orthogonal Regression

$$b = \frac{-(S_{xx} - S_{yy}) + \sqrt{(S_{xx} - S_{yy})^2 + 4 \cdot S_{xy}^2}}{2 \cdot S_{xy}}$$

$$a = \bar{y} - b\bar{x}$$

$$\sigma_b^2 = \sum \left\{ \sigma_{y_i}^2 \left(\frac{\partial b}{\partial y_i} \right)^2 + \sigma_{x_i}^2 \left(\frac{\partial b}{\partial x_i} \right)^2 + 2 \sigma_{x_i y_i} \left(\frac{\partial b}{\partial y_i} \right) \left(\frac{\partial b}{\partial x_i} \right) \right\}$$

$$\sigma_a^2 = \sum \left\{ \sigma_{y_i}^2 \left(\frac{\partial a}{\partial y_i} \right)^2 + \sigma_{x_i}^2 \left(\frac{\partial a}{\partial x_i} \right)^2 + 2 \sigma_{x_i y_i} \left(\frac{\partial a}{\partial y_i} \right) \left(\frac{\partial a}{\partial x_i} \right) \right\}$$

$$S_{xx} = \sum w_i \cdot (x_i - \bar{x})^2$$

$$S_{yy} = \sum w_i \cdot (y_i - \bar{y})^2$$

$$S_{xy} = \sum w_i \cdot (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

$$\bar{y} = \frac{\sum w_i y_i}{\sum w_i}$$

$$\bar{x} = \frac{\sum w_i x_i}{\sum w_i}$$

Fig. 3 : Formules ter berekening van de regressierechte die niet door de oorsprong gaat [$Y = a + b \cdot X$]

2 – Verhouding gemiddelde waarden

De verhouding van de gemiddelde waarde van beide meetreeksen, **PM10-FDMS** en **PM10-ruwe data**, wordt als tweede schatting gebruikt voor de factor die de verhouding tussen beide meetreeksen weergeeft:

$$\text{Factor} = \text{AM}_{\text{PM10-FDMS}} / \text{AM}_{\text{PM10-ruwe data}}$$

3 – Gemiddelde waarde van de dag aan dag berekende verhouding

Dag aan dag wordt de verhouding berekend tussen de resultaten van beide meetreeksen, **PM10-FDMS** en **PM10-ruwe data**. De gemiddelde waarde van deze dag aan dag berekende getallen geeft een derde schatting voor de verhouding tussen beide reeksen.

4 – Resultaten te Molenbeek

Jaarperiode - Evolutie sinds September 2003

In de meetpost te Molenbeek worden sedert september 2003 simultane metingen verricht voor **PM10-FDMS** en **PM10-ruwe data**. In tabel I wordt de verhouding tussen beide, “**PM10-FDMS**” over “**PM10-ruwe data**”, op drie verschillende manieren weergegeven:

- de helling van de gewogen orthogonale regressie door de oorsprong
- de verhouding van de gemiddelde waarden (AM) van beide reeksen
- de gemiddelde waarde van de dag aan dag berekende verhouding (AM-dagratio)

De berekening werd uitgevoerd voor de periode van *september – december 2003 (4 maanden)*, *september 2003 – januari 2004 (5 maanden)*, ..., *september 2003-augustus 2004 (12 maanden)* en dan telkens voor een volledige jaarperiode t/m de periode *september 2004 – augustus 2005*.

Tabel I – MOLENBEEK – Verhouding PM10-FDMS over PM10-ruwe data
Enkele maanden en JAARPERIODES

MOLENBEEK	Orthogonale Regressie $Y = b.X$			AM-PM10_FDMS over AM-PM10_ruwe data	AM-dagratio
	Periode	b	s{b}		
	2003.09 – 2003.12	1.3183	0.0189	110	
	2003.09 – 2004.01	1.3576	0.0189	141	1.37
	2003.09 – 2004.02	1.3858	0.0188	165	1.39
	2003.09 – 2004.03	1.4004	0.0180	196	1.43
	2003.09 – 2004.04	1.3936	0.0159	226	1.39
	2003.09 – 2004.05	1.3862	0.0153	257	1.39
	2003.09 – 2004.06	1.3595	0.0146	287	1.37
	2003.09 – 2004.07	1.3514	0.0139	315	1.33
	2003.09 – 2004.08	1.3346	0.0137	342	1.33
	2003.10 – 2004.09	1.3260	0.0137	352	1.35
	2003.11 – 2004.10	1.2888	0.0132	352	1.27
	2003.12 – 2004.11	1.2899	0.0134	352	1.27
	2004.01 – 2004.12	1.3155	0.0140	352	1.31
	2004.02 – 2005.01	1.2909	0.0139	352	1.27
	2004.03 – 2005.02	1.2811	0.0135	356	1.27
	2004.04 – 2005.03	1.2752	0.0127	356	1.28
	2004.05 – 2005.04	1.2722	0.0121	356	1.23
	2004.06 – 2005.05	1.2586	0.0120	354	1.24
	2004.07 – 2005.06	1.2637	0.0117	354	1.28
	2004.08 – 2005.07	1.2618	0.0118	357	1.28
	2004.09 – 2005.08	1.2643	0.0114	359	1.28

Bij de berekening geldt:

Y-ordinaat : R001_PM10_FDMS
X-abcis : R001_PM10_ruwe data

Doorlopende periode: 12, 13, ..., 23, 24 maanden - Evolutie sinds September 2003

Tabel II geeft analoge resultaten weer als tabel I, zij het voor een periode van 12 maanden of meer (elke periode start vanaf het begin van de metingen in september 2003).

**Tabel II – MOLENBEEK – Verhouding PM10-FDMS over PM10-ruwe data
Periodes van 12 tot 24 maanden**

MOLENBEEK	Orthogonale Regressie $Y = b.X$			AM-PM10_FDMS over AM-PM10_ruwe data	AM-dagratio
	Periode	b	s{b}		
2003.09 – 2004.08	1.3346	0.0137	342	1.33	1.34
2003.09 – 2004.09	1.3177	0.0130	370	1.30	1.33
2003.09 – 2004.10	1.2978	0.0125	401	1.31	1.31
2003.09 – 2004.11	1.3022	0.0119	431	1.31	1.31
2003.09 – 2004.12	1.3165	0.0113	462	1.30	1.31
2003.09 – 2005.01	1.3150	0.0110	493	1.31	1.31
2003.09 – 2005.02	1.3195	0.0106	521	1.35	1.31
2003.09 – 2005.03	1.3258	0.0101	552	1.35	1.31
2003.09 – 2005.04	1.3239	0.0095	582	1.30	1.31
2003.09 – 2005.05	1.3173	0.0093	611	1.31	1.30
2003.09 – 2005.06	1.3091	0.0091	641	1.31	1.29
2003.09 – 2005.07	1.3060	0.0090	672	1.31	1.29
2003.09 – 2005.08	1.2987	0.0088	701	1.31	1.28

Bij de berekening geldt:

Y-ordinaat : R001_PM10_FDMS
X-abcis : R001_PM10_ruwe data

De eerste kolom in de tabellen I, II en III verwijst naar de periode, de tweede, derde en vierde kolom geven de helling “**b**” van de berekende regressierechte, de standaardafwijking “**s(b)**” en het aantal koppels gegevens (**Ndata**). In de vijfde kolom wordt de “*verhouding weergegeven van het rekenkundig gemiddelde (AM) van beide meetreeksen*” en in de zesde kolom “*het gemiddelde van de dag aan dag berekende verhouding PM10-FDMS/PM10-ruwe data*”. De resultaten van de laatste kolom worden meer gedetailleerd weergegeven in figuur 4, waar de verschillende percentielen worden genoteerd voor de reeks van de dag aan dag berekende verhouding.

Voor de meetpost te Molenbeek bedraagt de verhouding **PM10-FDMS** over **PM10-ruwe data** ongeveer **1,30**. Uit de resultaten van figuur 4 kan echter opgemaakt worden dat deze factor varieert over een vrij ruim gebied, van ongeveer 0,7 tot 2,7, en dus geenszins constant is. Indien de resultaten PM10-FDMS inderdaad vrij goed zouden overeenstemmen met de referentiemethode betekent dit dat de optie voor een constante factor niet kan weerhouden worden voor de omzetting van PM10-ruwe data naar PM10-EqRef, waarden equivalent met de referentiemethode.

		Long Term Evolution of Daily Ratio "R001_PM10_FDMS / E001_PM10_Raw"																			
		Cumulative Frequency Distribution of the Daily Ratios "R001_PM10_FDMS / R001_PM10_raw"																			
Period	200309-200509	200309-200508	200309-200507	200309-200506	200309-200505	200309-200504	200309-200503	200309-200502	200309-200501	200309-200412	200309-200411	200309-200410	200309-200409	200309-200408							
Min		0,73	0,73	0,73	0,73	0,73	0,73	0,73	0,78	0,79	0,79	0,81	0,81	0,81							
P2		0,83	0,83	0,83	0,83	0,83	0,84	0,84	0,85	0,85	0,86	0,86	0,86	0,86							
P5		0,88	0,88	0,89	0,89	0,89	0,89	0,88	0,90	0,91	0,91	0,90	0,91	0,92							
P10		0,96	0,96	0,96	0,96	0,96	0,96	0,96	0,96	0,96	0,96	0,96	0,97	1,00							
P20		1,04	1,04	1,05	1,05	1,05	1,05	1,04	1,05	1,05	1,05	1,04	1,06	1,06							
P30		1,10	1,10	1,11	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,12	1,12	1,11	1,14	1,14							
P40		1,18	1,18	1,20	1,20	1,20	1,20	1,20	1,20	1,20	1,19	1,19	1,21	1,23							
P50		1,24	1,24	1,25	1,26	1,27	1,27	1,27	1,27	1,27	1,26	1,25	1,28	1,30							
P60		1,32	1,32	1,33	1,33	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,34	1,33	1,36	1,38							
P70		1,41	1,41	1,42	1,42	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,43	1,43	1,45	1,47							
P80		1,50	1,50	1,51	1,52	1,54	1,55	1,56	1,56	1,56	1,55	1,57	1,58	1,60							
P90		1,65	1,65	1,67	1,67	1,68	1,68	1,69	1,69	1,69	1,69	1,70	1,71	1,71							
P95		1,79	1,79	1,79	1,80	1,82	1,84	1,83	1,85	1,88	1,89	1,89	1,91	1,92							
P98		2,00	2,00	2,00	2,00	2,02	2,05	2,07	2,08	2,10	2,11	2,12	2,12	2,12							
P99		2,12	2,12	2,12	2,12	2,13	2,14	2,15	2,16	2,17	2,18	2,19	2,20	2,21							
Max		2,68	2,68	2,68	2,68	2,68	2,68	2,68	2,68	2,68	2,68	2,68	2,68	2,68							
AM		1,28	1,29	1,29	1,29	1,31	1,31	1,31	1,31	1,31	1,31	1,31	1,33	1,34							
ASD		0,29	0,29	0,29	0,29	0,29	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,31	0,31	0,31							
GM		1,25	1,26	1,26	1,26	1,28	1,28	1,27	1,28	1,28	1,28	1,27	1,29	1,31							
GSD		1,24	1,24	1,24	1,24	1,24	1,25	1,25	1,25	1,25	1,25	1,25	1,25	1,25							

Fig. 4 : Cumulatieve frequentieverdeling van de dagratio – reeks van de dag per dag berekende verhouding **PM10-FDMS / PM10-ruwe data**

Cumulative Frequency Distribution of the Daily Ratios 'N043_PM10_FDMS / N043_PM10_raw'																				
Period	200409-200508		200409-200507		200409-200506		200409-200505		200409-200504		200409-200503		200409-200502		200409-200501		200409-200412		200409-200411	
	Min	0,55	0,73	0,55	0,73	0,55	0,73	0,55	0,72	0,55	0,72	0,55	0,70	0,55	0,63	0,55	0,60	0,55	0,59	0,56
P2	0,78	0,78	0,87	0,78	0,77	0,77	0,77	0,77	0,77	0,77	0,77	0,77	0,75	0,75	0,74	0,74	0,74	0,74	0,74	0,74
P5	0,87	0,95	0,87	0,94	0,85	0,93	0,83	0,92	0,82	0,91	0,81	0,89	0,78	0,88	0,78	0,88	0,77	0,87	0,78	0,85
P10	1,00	1,07	1,00	1,07	1,00	1,05	0,97	1,02	0,96	0,96	0,96	0,96	0,94	0,94	0,93	0,92	0,92	0,92	0,89	0,89
P20	1,07	1,12	1,07	1,12	1,05	1,10	1,02	1,08	1,00	1,07	1,00	1,06	0,99	0,99	0,97	0,96	0,96	0,96	0,94	0,94
P30	1,12	1,18	1,12	1,18	1,10	1,17	1,08	1,14	1,07	1,13	1,06	1,06	1,03	1,03	1,00	1,00	1,00	1,00	0,97	0,97
P40	1,18	1,25	1,18	1,24	1,17	1,22	1,14	1,21	1,13	1,20	1,10	1,10	1,09	1,09	1,06	1,06	1,04	1,04	1,00	1,00
P50	1,25	1,31	1,24	1,31	1,22	1,30	1,21	1,29	1,20	1,29	1,18	1,18	1,15	1,15	1,10	1,10	1,09	1,09	1,03	1,03
P60	1,31	1,43	1,31	1,43	1,30	1,41	1,30	1,39	1,30	1,40	1,29	1,29	1,24	1,24	1,20	1,20	1,18	1,18	1,08	1,08
P70	1,43	1,51	1,43	1,52	1,41	1,50	1,39	1,48	1,40	1,48	1,41	1,41	1,36	1,36	1,33	1,29	1,29	1,29	1,18	1,18
P80	1,51	1,76	1,52	1,81	1,50	1,75	1,48	1,63	1,48	1,65	1,49	1,49	1,43	1,43	1,36	1,36	1,35	1,35	1,23	1,23
P90	1,76	1,93	1,81	1,93	1,75	1,93	1,63	1,78	1,65	1,82	1,64	1,64	1,57	1,57	1,49	1,49	1,36	1,36	1,27	1,27
P95	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	1,86	1,86	1,67	1,67	1,58	1,58	1,36	1,36
P98	1,14	0,24	1,14	0,24	1,12	0,24	1,10	0,23	1,10	0,24	1,09	0,24	1,06	0,23	1,03	0,21	1,01	0,20	0,97	0,15
P99	0,24	1,12	0,24	1,11	0,24	1,10	0,23	1,08	0,24	1,07	0,24	1,06	0,23	1,04	0,21	1,01	0,20	1,00	0,15	0,15
Max	1,12	1,23	1,14	1,24	1,12	1,24	1,10	1,24	1,10	1,24	1,09	1,25	1,06	1,24	1,03	1,23	1,01	1,22	0,96	1,18

Fig. 5 : Cumulatieve frequentieverdeling van de dagratio – reeks van de dag per dag berekende verhouding **PM10-FDMS / PM10-ruwe data**

6 – Resultaten te Ukkel

Jaarperiode

In de meetpost te Ukkel worden geen simultane metingen verricht van **PM10-FDMS** en **PM10-ruwe data**. De verhouding tussen beide reeksen wordt indirect bekomen door de meetwaarden te Ukkel (R012) te vergelijken met PM10-ruwe data van de meetpost te St.-Agatha-Berchem (B011).

De verhouding tussen **R012_PM10_ruwe data** en **B011_PM10_ruwe data** werd vastgelegd voor de één jaar durende periode “1 mei 2003 – 30 april 2004”.

De verhouding tussen **R012_PM10_FDMS** en **B011_PM10_ruwe data** werd vastgelegd voor de één jaar durende periode “1 mei 2004 – 30 april 2005”, “1 juni 2004 – 31 mei 2005” en “1 juli 2004 – 30 juni 2005”.

De verhouding tussen de ratio van beide periodes laat toe de verhouding te kennen tussen **R012_PM10_FDMS** en **R012_PM10_ruwe data** (resultaten in het vet in tabel IV):

**Tabel IV: UKKEL - Verhouding PM10-FDMS over PM10-ruwe data
Jaarperiode**

	Periode	Orthogonale Regressie $Y = b.X$	Verhouding AM van de meetreeksen	AM - Dagratio
1	R012_raw / B011_raw 2003.05 – 2004.04	1.1958	1.24	1.26
9	R012_Fdms / B011_raw 2004.05 – 2005.04	1.7265	1.75	1.69
9/1	R012_Fdms/R012_raw	1.444	1.41	1.34
10	R012_Fdms / B011_raw 2004.06 – 2005.05	1.6996	1.69	1.66
10/1	R012_Fdms/R012_raw	1.421	1.36	1.32
11	R012_Fdms / B011_raw 2004.07 – 2005.06	1.6944	1.65	1.66
11/1	R012_Fdms/R012_raw	1.417	1.33	1.32

De verhouding **PM10-FDMS** over **PM10-ruwe data** te Ukkel bedraagt ongeveer **1,42**.