



---

**Forschungszentrum Karlsruhe**  
Technik und Umwelt

---

**Wissenschaftliche Berichte**  
FZKA 5703

**Lernen ohne Hilfestellung**  
**Entwurf eines neuen Klassifikationsverfahrens und seine**  
**Anwendung zur Klassifikation**  
**von Kongenerenverteilungen**

**R. Seifert**

Institut für Angewandte Informatik  
Projekt Schadstoff- und Abfallarme Verfahren

Februar 1996

---



**Forschungszentrum Karlsruhe**

**Technik und Umwelt**

**Wissenschaftliche Berichte**

**FZKA 5703**

**"Lernen ohne Hilfestellung"**  
**Entwurf eines neuen Klassifikationsverfahrens und**  
**seine Anwendung zur Klassifikation von**  
**Kongerenenverteilungen**

**R. Seifert**

**Institut für Angewandte Informatik**  
**Projekt Schadstoff- und Abfallarme Verfahren**

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe**

**1996**

**Als Manuskript gedruckt  
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor**

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH  
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe**

**ISSN 0947-8620**

## **Zusammenfassung:**

In diesem Bericht wird ein neues Verfahren vorgestellt, das sog. "Lernen ohne Hilfestellung". Dieses Verfahren kann bei Klassifikationsproblemen eingesetzt werden, bei denen weder die Klassenparameter noch die Anzahl der Klassen bekannt sind. Dieses Problem liegt vor, wenn man aus Kongenerenverteilungen auf ihre Emissionsquellen schließen will. Anhand eines konkreten Beispiel mit Kongenerenverteilungen aus verschiedenen Müllverbrennungsanlagen wird gezeigt, daß das entwickelte Verfahren in der Lage ist, die unterschiedlichen Emissionsquellen zu klassifizieren und die Kongenerenverteilungen weitestgehend den richtigen Emissionsquellen zuzuordnen. Gezeigt wird auch, wie mit Hilfe des Verfahrens weitergehende Untersuchungen wie Plausibilitätsbetrachtungen durchgeführt werden können. Realisiert ist das Verfahren "Lernen ohne Hilfestellung" in einem PC-Programm KLASSI.

## **Learning Without Assistance**

### **A New Classification Method And Its Application to Classify Congener Patterns**

#### **Abstract:**

In this report a new classification method is introduced, the method "Learning without assistance". This method is suitable when in the classification problem under consideration neither the parameters of the classes nor the number of classes are known. Such a problem arises when analyzing congener patterns. An example with real congener patterns from solid waste incinerators demonstrates the applicability of the new developed classification method. The method "Learning without assistance" is realised in a PC-program called KLASSI.

## Gliederung

1. Problemstellung	5
2. Klassifikationsprobleme	6
3. Idee des neuen Klassifikationsverfahrens	8
4. Konkrete Beschreibung des Verfahrens	8
5. Vergleich der drei Klassifikationsverfahren. Fehlerbetrachtungen	10
6. Softwareentwicklung	11
7. Reale Ergebnisse	12
8. Diskussion der Ergebnisse	16
9. Zusammenfassung	16
Literatur	18
Anhang 1: Die zu untersuchenden Kongenerenverteilungen	20
Anhang 2: Beschreibung der Klassenparameter nach Untersuchung 1	25
Anhang 3: Tabelle der gewichteten Abstände der einzelnen Realisierungen zu den Klassen nach Untersuchung 1	28
Anhang 4: Beschreibung der Klassenparameter nach Untersuchung 2	37
Anhang 5: Tabelle der gewichteten Abstände der einzelnen Realisierungen zu den Klassen nach Untersuchung 2	40



## 1. Problemstellung

Bei der Messung halogener, organischer Verbindungen, wie zum Beispiel polychlorierter Dioxine, Furane, Benzole oder Phenole, erhält man als Ergebnis zunächst die absoluten Konzentrationswerte. Darüber hinaus kann man jedoch auch die sogenannten Kongenerenverteilungen betrachten. Das sind diejenigen Verteilungen, die den prozentualen Anteil einzelner Kongenere an der gemessenen Gesamtkonzentration beschreiben. Die Bedeutung dieser Kongenerenverteilungen liegt darin, daß sie eine Identifikation von Emissionsquellen erlauben. Während nämlich die absoluten Konzentrationswerte auch bei gleichen Emissionsquellen stark schwanken können, besitzen unterschiedliche Emissionsquellen verschiedene "typische Muster" in Bezug auf die Kongenerenverteilungen.

In dieser Arbeit soll untersucht werden, ob aus einer Anzahl verschiedener Kongenerenverteilungen diese "typischen Muster" erkannt werden können und die unterschiedlichen Verteilungen diesen "Mustern" zugeordnet werden können.

Dazu wurden 42 Kongenerenverteilungen untersucht, die jeweils aus 20 Merkmalen bestehen. Diese 20 Merkmale setzen sich aus fünf verschiedenen Dioxinwerten, fünf verschiedenen Furanwerten, fünf verschiedenen Benzolwerten und fünf verschiedenen Phenolwerten zusammen.

(Die 42 Kongenerenverteilungen sind im Anhang 1 gelistet. Die fünf Dioxin-Spezies, die fünf Furan-Spezies, die fünf Phenol-Spezies und die fünf Benzol-Spezies ergeben jeweils zusammen 1, das heißt 100%.)

Dabei war nicht bekannt, aus welcher Emissionsquelle die einzelnen Kongenerenverteilungen stammen, es war nicht bekannt, welches die "typischen Muster" der einzelnen Emissionsquellen sind und es war nicht bekannt, aus wievielen Emissionsquellen die Kongenerenverteilungen stammen.

Es handelt sich also um ein Klassifikationsproblem, bei dem weder die Klassenanzahl noch die Klassenparameter bekannt sind. Deshalb wurde ein neues Klassifizierungsverfahren entwickelt, um obiges Klassifizierungsproblem zu lösen. Dadurch unterscheidet sich diese Arbeit auch von /1/, bei dem beliebige, eigentlich auf das Problem nicht "passende" mathematische Verfahren angewendet wurden.



## 2. Klassifikationsprobleme

Wie schon erwähnt führt obiges Problem zu einem Klassifikationsproblem. Eine Meßreihe (Realisierung) besteht aus  $m$  (in diesem Fall  $4 \times 5 = 20$ ) Werten (Ausprägungen oder Merkmalen). Insgesamt liegen  $n$  (in diesem Fall 42) Realisierungen vor, die in  $K$  Klassen eingeteilt werden sollen, wobei  $K$  unbekannt ist. Da die einzelnen Realisierungen aus Messungen bestehen, bei denen Meßungenauigkeiten nicht ausgeschlossen werden können, ist es naheliegend, sie als Realisierungen von ( $m$ -dimensionalen) Zufallsgrößen aufzufassen. Das heißt, jede Klasse wird durch eine ( $m$ -dimensionale) Zufallsgröße repräsentiert. Die Frage lautet, welcher Zufallsgröße (Klasse) läßt sich eine Realisierung zuordnen. Dazu machen wir folgende Grundannahme: Jede Einzelmessung läßt sich durch eine geeignete Normalverteilung beschreiben, die Zufallsgrößen sind also  $m$ -dimensional normalverteilt.

Klassifikationsprobleme sind in der Literatur ausführlich behandelt. Dabei können zwei Fälle unterschieden werden (siehe auch /2/): Das "Lernen mit Lehrer" und das "Lernen ohne Lehrer", auch als "(automatische) Cluster-Analyse" bekannt.

### 1) "Das Lernen mit Lehrer"

In diesem Fall geht man davon aus, daß sowohl bekannt ist, wieviele Klassen  $K$  vorliegen, als auch die Verteilungen der diese Klassen repräsentierenden Zufallsgrößen bekannt sind. Nach dem Bayes'schen Theorem gilt dann:

$$p(k|\underline{x}) = \frac{p(\underline{x}|k) * p(k)}{p(\underline{x})}$$

Dabei ist:

$p(k)$	die Wahrscheinlichkeit für die Klasse $k$
$p(\underline{x} k)$	die Dichteverteilung der Klasse $k$
$p(\underline{x})$	die Dichte der zu untersuchenden Zufallsgröße $\underline{X}$
$p(k \underline{x})$	die Wahrscheinlichkeit, daß bei gegebenen $\underline{x}$ die Klasse $k$ vorliegt.

Es liegt nahe, eine Realisierung  $\underline{x}$  derjenigen Klasse  $k$  zuzuordnen, für die

$$p(k|\underline{x}) \text{ maximal}$$

bzw.

$$d_k(\underline{x}) = -\ln(p(k|\underline{x})) \text{ minimal}$$

ist.  $d_k(\underline{x})$  wird auch als "Klassifikator" bezeichnet.

Sind z.B. alle  $p(k)$  gleich und alle die Klassen  $k$  repräsentierenden Zufallsgrößen  $\underline{X}^k$  normalverteilt mit Varianzmatrizen  $\Sigma^k$  und Erwartungsvektor  $\underline{\mu}^k$ , so läßt sich der entsprechende Klassifikator bis auf eine Konstante wie folgt ausdrücken:

$$(1) \quad d_k(\underline{x}) = 1/2 * (\underline{x} - \underline{\mu}^k)^T * (\Sigma^k)^{-1} * (\underline{x} - \underline{\mu}^k) + 1/2 * \ln(\det \Sigma^k)$$

## 2) "Das Lernen ohne Lehrer" (Cluster-Analyse)

Bei diesem Klassifikationsproblem kennt man nicht die Verteilungen (bzw. die Parameter der Verteilungen) der die Klassen repräsentierenden Zufallsgrößen. Das einzig bekannte ist die Anzahl  $K$  der verschiedenen Klassen. Die unbekanntes Verteilungsparameter sind bei der Normalverteilung die Varianzmatrix  $\Sigma^k$  und der Erwartungsvektor  $\underline{\mu}^k$ . Diese gehen dann in den Klassifikator (1) als Parameter ein.

Wählt man nun eine beliebige Klassifikation, d.h. eine willkürliche Klasseneinteilung, so kann man diese Parameter aus den Daten schätzen. Sodann kann man die "Variabilität" innerhalb der einzelnen Klassen, sowie die "Variabilität" zwischen den Klassen berechnen. Als beste Klassifikation wird dann diejenige Klasseneinteilung angesehen, für die die "mittlere Variabilität" zwischen den Klassen minimal ist. Diese optimale Klassifikation kann iterativ ermittelt werden.

In dem hier zu untersuchendem Fall sind aber weder die Parameter der (Normal-)Verteilungen der die Klassen repräsentierenden Zufallsgrößen bekannt noch die Anzahl  $K$  der verschiedenen Klassen. Somit kann weder das "Lernen mit Lehrer" noch das "Lernen ohne Lehrer" auf das hier zu behandelnde Klassifikationsproblem angewendet werden. Daraus wird auch ersichtlich, warum die in /1/ eingesetzten "klassischen" Klassifizierungsverfahren zu keinem befriedigendem Ergebnis führten.

Deshalb muß für das "Kongeneren-Klassifikationsproblem" ein neues Klassifikationsverfahren entwickelt werden. Ein Klassifikationsverfahren, bei dem weder die Verteilungen (bzw. die Parameter der Verteilungen) der die Klassen repräsentierenden Zufallsgrößen noch die Anzahl  $K$  der verschiedenen Klassen bekannt ist.

Im folgenden Abschnitt wird die Idee für dieses neue Klassifikationsverfahren vorgestellt.

### 3. Idee des neuen Klassifikationsverfahrens

Die Idee für das Klassifikationsverfahren ohne Vorkenntnisse besteht darin, daß man zunächst annimmt, daß alle Realisierungen  $\underline{x}_i$  einer Klasse angehören, die durch die (normalverteilte) Zufallsgröße  $\underline{X}^1$  repräsentiert wird. Somit kann man die unbekannt Parameter  $\Sigma^1$  und  $\underline{\mu}^1$  schätzen. Danach bestimmt man diejenige Realisierung, die den "größten Abstand zur Klasse 1" hat. Ist dieser Abstand "zu groß", so entfernt man diese Realisierung aus Klasse 1, schätzt wieder die unbekannt Parameter  $\Sigma^1$  und  $\underline{\mu}^1$  und bestimmt erneut die Realisierung mit dem "größten Abstand". Dies wird solange fortgeführt, bis eine "Realisierung mit größtem Abstand" einen "Abstand zur Klasse 1" hat, der "klein genug" ist. Die nicht entfernten Realisierungen werden dann Klasse 1 zugeordnet. Für die aus Klasse 1 entfernten Realisierungen wird das Verfahren erneut angewendet.

Die Vorgehensweise kann wie folgt beschrieben werden:

- (1) Annahme: Alle (verbliebenen) Realisierungen gehören zu Klasse k
- (2) Bestimme die Klassenparameter  $\Sigma^k$  und  $\underline{\mu}^k$   
Berechne diejenige Realisierung  $\underline{x}_{i_0}$ , die den "größten Abstand" hat  
Ist der Abstand "zu groß", entferne  $\underline{x}_{i_0}$  aus Klasse k und gehe zu (2)  
sonst gehören alle nicht entfernten Realisierungen zu Klasse k  
Falls noch Realisierungen übrig (verblieben) sind, erhöhe k um 1 und gehe zu (1)

### 4. Konkrete Beschreibung des Verfahrens

In diesem Abschnitt wird das in Abschnitt 3 skizzierte Verfahren konkretisiert. Insbesondere werden Begriffe wie "größter Abstand", "Abstand zu groß" usw. präzisiert.

Zunächst wird die Annahme getroffen, daß alle (verbliebenen) n Realisierungen zu Klasse k gehören. Die Klassenparameter  $\Sigma^k$  und  $\underline{\mu}^k$  können dann wie folgt (aus den Daten) geschätzt werden:

$$\underline{\mu}^k = \frac{1}{n} * \sum_{i=1}^n \underline{x}_i$$

und

$$\Sigma^k = (\sigma_{jl}^k)_{j,l=1,\dots,m} \quad \text{mit}$$

$$\sigma^{k_{jl}} = \frac{1}{(n-1)} * \sum_{i=1}^n (x_{ij} - \mu^{k_j}) * (x_{il} - \mu^{k_l})$$

Dabei bezeichnet der hochgestellte Index k die Klasse k. Der tiefgestellte Index i durchläuft die Anzahl der zu untersuchenden Realisierungen (in diesem konkreten Beispiel zu Beginn 42 Realisierungen). Die tiefgestellten Indizes j und l bezeichnen die Merkmale oder Ausprägungen der Realisierungen bzw. der Klassen (in diesem konkreten Beispiel 20 Ausprägungen oder Merkmale).

$\underline{x}_i$  ist dabei die i-te Realisierung, ein Vektor, der aus den m Ausprägungen besteht.

$x_{ij}$  ist also die j-te Ausprägung der i-ten Realisierung.

Danach betrachtet man diejenige Realisierung  $\underline{x}_{i_0}$ , die den "größten Abstand" zur Klasse k hat. Als Abstand wählt man nicht den euklidischen Abstand, sondern den durch die die Meßgenauigkeiten repräsentierenden Kovarianzen gewichteten Abstand:

$$d(\underline{x}_i, \underline{X}^k) = (\underline{x}_i - \underline{\mu}^k)^T * (\Sigma^k)^{-1} * (\underline{x}_i - \underline{\mu}^k).$$

Dieser Abstandsbegriff entspricht dem Klassifikator (1) in Abschnitt 2, da in der Klasse k der Ausdruck  $1/2 * \ln(\det \Sigma^k)$  konstant ist.

Die Realisierung mit dem "größten Abstand" ist dann dasjenige  $\underline{x}$ , für das  $d(\underline{x}, \underline{X}^k)$  maximal ist. Ob der "Abstand zu groß" ist, wird mittels eines Signifikanztests zum Niveau  $\alpha$  bestimmt. Mittels eines Signifikanztests kann zwischen zwei Alternativen entschieden werden, der sogenannten Nullhypothese  $H_0$  und der Alternative  $H_1$ . Dabei können zwei Fehler auftreten: Man entscheidet sich für die Alternative, obwohl die Nullhypothese vorliegt (Fehler 1. Art) oder man entscheidet sich für die Nullhypothese, obwohl die Alternative vorliegt (Fehler 2. Art). Beide Fehler sind gegenläufig. Eine Verminderung des Fehlers 1. Art bewirkt eine Vergrößerung des Fehlers 2. Art. Bei einem Signifikanztest zum Niveau  $\alpha$  wird der Fehler 1. Art durch  $\alpha$  begrenzt.

In diesem Fall hat man für das  $\underline{x}$  mit dem maximalen Abstand zwischen den Alternativen:

$H_0$ :  $\underline{x}$  gehört zur Klasse k

und

$H_1$ :  $\underline{x}$  gehört nicht zur Klasse k

zu entscheiden.

Als Testfunktion bietet sich der (nicht-sequentielle) GEMUF-Test /3/ an. Dieses Testverfahren wurde im Forschungszentrum Karlsruhe im Zusammenhang mit Materialüberwachungsproblemen entworfen und findet dort in seiner sequentiellen Form Anwendung. Der GEMUF-Test hat folgende Teststatistik:

$$d(\underline{x}, \underline{X}^k) > s_\alpha \quad \text{verwerfe } H_0$$

bzw.

$$d(\underline{x}, \underline{X}^k) < s_\alpha \quad \text{verwerfe } H_1.$$

Die Testschranke  $s_\alpha$  wird wie folgt bestimmt:

$$P_{H_0}(d(\underline{x}, \underline{X}^k) > s_\alpha) < \alpha,$$

das heißt, man verwirft die Annahme, daß  $\underline{x}$  zu Klasse  $k$  gehört, obwohl  $\underline{x}$  tatsächlich aus Klasse  $k$  stammt, höchstens mit Wahrscheinlichkeit  $\alpha$ .

Da  $d(\underline{x}, \underline{X}^k)$  unter  $H_0$  zentral  $\chi^2$ -verteilt ist mit  $m$  Freiheitsgraden, kann man die Schranken  $s_\alpha$  in Abhängigkeit des Fehlers 1. Art  $\alpha$  aus entsprechenden Tabellen ablesen.

## 5. Vergleich der drei Klassifikationsverfahren. Fehlerbetrachtungen

Im ersten Klassifikationsproblem ("Lernen mit Lehrer") sind die Anzahl der Klassen  $K$  und die Verteilungen der die Klassen repräsentierenden Zufallsgrößen bekannt. Bestimmt wird durch dieses Verfahren eine Klasseneinteilung der Realisierungen.

Im zweiten Klassifikationsproblem ("Lernen ohne Lehrer") ist nur die Anzahl  $K$  der Klassen bekannt. Bestimmt werden durch dieses Verfahren die Verteilungen der die Klassen repräsentierenden Zufallsgrößen und eine Klasseneinteilung der Realisierungen.

Im dritten Klassifikationsproblem (hier auch als "Lernen ohne Hilfestellung" bezeichnet) ist a priori nichts bekannt. Bestimmt werden durch dieses Verfahren die Anzahl  $K$  der verschiedenen Klassen, die Verteilungen der die Klassen repräsentierenden Zufallsgrößen und eine Klasseneinteilung der Realisierungen.

Bei jeder (insbesondere statistischen) Entscheidung sind Fehler prinzipiell möglich. Beim "Lernen mit Lehrer" können Realisierungen falschen Klassen zugeordnet werden. Beim "Lernen ohne Lehrer" können die Verteilungen der die Klassen repräsentierenden Zufallsgrößen falsch geschätzt werden und Realisierungen falschen Klassen zugeordnet werden. Beim "Lernen ohne Hilfestellung" kann zudem eine falsche Anzahl von Klassen  $K$  ermittelt werden. Prinzipiell kann gesagt werden, daß bei den drei Verfahren sukzessive die

Vorkenntnisse verringert werden. Analog dazu werden natürlich die "Entscheidungsunsicherheiten" größer.

Entscheidend beim "Lernen ohne Hilfestellung" ist die Wahl des Signifikanzniveaus  $\alpha$ . Setzt man im Extremfall  $\alpha=0$ , so nimmt die Teststatistik den Wert unendlich an. Das heißt, bei keiner Realisierung  $\underline{x}$  wird die Nullhypothese verworfen. Das hat zur Folge, daß alle Realisierungen der Klasse 1 zugeordnet werden. Man erhält also  $K=1$ . Alle Realisierungen, die zu dieser Klasse gehören, werden auch dieser Klasse richtig zugeordnet. Andererseits werden alle Realisierungen, die nicht zu dieser Klasse gehören, einer falschen Klasse zugeordnet. Dadurch, daß viele falsche Realisierungen dieser Klasse zugeordnet werden, werden natürlich auch die Klassenparameter falsch geschätzt. Im anderen Extremfall  $\alpha=1$  bzw.  $s=0$  werden so viele Klassen bestimmt, wie Realisierungen vorliegen. Keine Realisierung wird einer "falschen" Klasse zugeordnet, jedoch werden die Klassenzusammenhänge nicht erkannt. Insbesondere ist die Varianz jeder Klasse 0. Über den Parameter  $\alpha$  wird also direkt die Klassenanzahl  $K$  ermittelt und dann natürlich auch die Klasseneinteilung. Eine geeignete Wahl des Signifikanzniveaus  $\alpha$  kann nicht allgemein vorgegeben werden, sie hängt stark vom betrachteten Problem ab.

Daß eine Klasseneinteilung umso "fehlerloser" sein wird, je größer die "gewichteten" Abstände der einzelnen Klassen ist, gilt für alle drei Verfahren.

Im Hinblick auf die oben beschriebenen Klassifikationsunsicherheiten, die unvermeidlich sind und aus der Unsicherheit der Daten und mangelnden Vorkenntnissen herrühren, sollten Ergebnisse (das heißt insbesondere Klasseneinteilungen, aber auch die Verteilungsparameter und die resultierende Klassenanzahl) mit dem konkreten Problem verglichen und analysiert werden. So können beim "Lernen ohne Vorkenntnisse" durch Variation des Signifikanzniveaus  $\alpha$  bzw. der Testschranke  $s$  Plausibilitätsstudien durchgeführt werden.

## 6. Softwareentwicklung

Zur automatischen Lösung des Klassifikationsproblems "Lernen ohne Hilfestellung" für das Kongenerenproblem wurde ein Programmpaket KLASSI realisiert.

Das Kernstück dieses Pakets ist das Programm KLAS1, das ausgehend von den Realisierungen die Klassenanzahl  $K$ , die Klassenparameter und die Klasseneinteilungen bestimmt. Dabei wurde vereinfachend die Annahme gemacht, daß keine Korrelationen zwischen den einzelnen Messungen auftreten, das heißt, daß die Varianzmatrizen von Null verschiedene Werte nur in der Hauptdiagonalen besitzen. (Diese Annahme ist natürlich nicht zutreffend, da durch die Normierung auf 1 auf jeden Fall Korrelationen zumindest innerhalb der einzelnen Merkmalsgruppen auftreten. Die oben gemachte Annahme geht von der Hoffnung aus, daß diese Korrelationen vernachlässigbar sind.)

Der wichtigste Eingabeparameter ist natürlich wie oben schon diskutiert, das Signifikanzniveau  $\alpha$ . Dieses  $\alpha$  kann entweder für einen gesamten Durchlauf des Klassifizierungsverfahrens fest vorgewählt werden oder interaktiv bei jeder Hypothesenentscheidung eingegeben werden.

Des Weiteren kann über Eingabeparameter gewählt werden, ob alle Ausprägungen der Realisierungen zur Klassifizierung verwendet werden sollen oder nur eine bestimmte Gruppe (z.B. Dioxin) oder mehrere Gruppen (z.B. Dioxin, Phenol und Benzol).

Darüber hinaus kann über weitere Eingabeparameter der Umfang der ausgegebenen Ergebnisse gesteuert werden. So ist es bei einer detaillierten Studie oft hilfreich, weitere Ergebnisse und/oder Zwischenergebnisse zu untersuchen.

Das ebenfalls im Paket KLASSI enthaltene Programm KLAS2 bestimmt, ausgehend von einer Klasseneinteilung und den Parametern dieser Klassen, die gewichteten Abstände der verschiedenen Realisierungen zu den einzelnen Klassen. Diese Ergebnisse sind ebenfalls sehr hilfreich hinsichtlich Plausibilitätsuntersuchungen der ermittelten Klasseneinteilung.

Das Programm MW ermittelt aus einer beliebigen Klasseneinteilung die Klassenparameter.

Das Simulationsprogramm SIM simuliert ausgehend von vorgegebenen Klassenparametern Realisierungen der einzelnen Klassen. Mit Hilfe des Programms KLAS1 kann dann analysiert werden, wie "gut" die resultierende Klasseneinteilung des Verfahrens "Lernen ohne Hilfestellung" ist.

Das Programmpaket KLASSI wurde in der Programmiersprache FORTRAN realisiert. Es läuft unter PCs mit Betriebssystem DOS.

## 7. Reale Ergebnisse

Die oben erwähnten 42 Kongenerenverteilungen wurden mit Hilfe des Programms KLAS1 aus dem Programmpaket KLASSI untersucht.

Das Signifikanzniveau  $\alpha$  wurde dabei einmal auf 5% und danach auf 25% gesetzt. Aus entsprechenden Tabellen ergeben sich daraus die Testschranken 31.42 und 23.8. Abbildung 1 zeigt das Ergebnis für den ersten Fall, Abbildung 2 das Ergebnis für den zweiten Fall.

Zunächst fällt auf, daß es bei beiden Untersuchungen eine unterschiedliche Anzahl von Klassen gibt. Deshalb können natürlich auch die Klasseneinteilungen nicht übereinstimmen. Eine genauere Analyse führt aber zu folgenden Überlegungen.

Bei beiden Untersuchungen ergibt sich eine Klasse, die aus den Realisierungen 9-16 gebildet werden. Eine weitere Klasse bilden die Realisierungen 1-8, wobei die Zugehörigkeit der Realisierungen 4 und 6 zu dieser Klasse etwas fraglich erscheint, da die zweite Untersuchung

( $\alpha=25\%$ ) sie aus dieser Klasse entfernt. Die erste Untersuchung ( $\alpha=5\%$ ) findet eine dritte Klasse mit den Realisierungen 17 - 40 ohne 25 und 33. Die zweite Untersuchung splittet diese Klasse in zwei weitere Klassen auf und entfernt zusätzlich die Realisierungen 23, 29, 36 und 37. Des Weiteren liegt die Vermutung nahe, daß die Realisierungen 41 und 42 eine eigene Klasse bilden, da bei weiteren Untersuchungen mit anderen Signifikanzniveaus diese beiden Elemente nie getrennt wurden.

Folgende Klasseneinteilung liegt somit nahe:

Eine (stabile) Klasse mit den Elementen: 9,10,11,12,13,14,15,16.

Eine weitere Klasse mit den Elementen: 1,2,3,4,5,6,7,8, wobei die Elemente 4 und 6 kritisch sind.

Dann entweder eine weitere Klasse mit den Elementen 17 - 40 ohne 25 und 33, oder zwei weitere Klassen mit den Elementen 18,20,21,24,26,27,28,34 bzw. 17,19,22,30,31,32,35,38,39,40.

Ob die Elemente 23,25,29,33,36,37 eine Klasse bilden, kann nicht mit Sicherheit gesagt werden.

Eine letzte Klasse mit den Elementen 41 und 42.

Ferner ergeben sich aus den Untersuchungen mit Hilfe des Programms KLAS1 auch die Mittelwerte und Varianzen der Klassen, mit anderen Worten eine Beschreibung der Emissionsquellen. Diese Klassenparameter sind im Anhang gelistet: für die Untersuchung 1 im Anhang 2 und für Untersuchung 2 im Anhang 4.

Mit Hilfe des Programms MW können die Mittelwerte und Varianzen ebenfalls bestimmt werden. Dabei können fragliche Elemente aus der Bestimmung der Klassenparameter entfernt werden. Deshalb eignet sich dieses Programm für weitergehende Untersuchungen wie Plausibilitätsbetrachtungen.

Mit Hilfe des Programms KLAS2 können dann die gewichteten Abstände zu den einzelnen Klassen berechnet werden. Auch damit können weitere Untersuchungen wie Plausibilitätsbetrachtungen durchgeführt werden. Die gewichteten Abstände der Kongenerenverteilungen von den Klassen sind im Anhang gelistet: für Untersuchung 1 im Anhang 3 und für Untersuchung 2 im Anhang 4.



```

*****
* PROGRAM TO CLASSIFY POINTS IN IR**N *
* * *
* DATE : JANUARY 1995 *
* LANGUAGE: FORTRAN77 *
* AUTHOR : R. SEIFERT *
* * *
* FORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE *
* * *
*****

*****
ERGEBNIS DER KLASSENEINTEILUNG
*****

Folgender Datensatz wurde untersucht:
      c:\klassi\kneu.dat

Folgende Gruppen wurden berücksichtigt:
      Dioxine
      Furane
      Phenole
      Benzole

Wert=Testschranke:      31.42000

Anzahl der Klassen : 4

Elemente pro Klasse: 22  8  8  4

Klasse 1: 17 18 19 20 21 22 23 24 26 27 28 29 30 31 32
           34 35 36 37 38 39 40
Klasse 2:  9 10 11 12 13 14 15 16
Klasse 3:  1  2  3  4  5  6  7  8
Klasse 4: 25 33 41 42

```

Abbildung 1: Klasseneinteilung nach Untersuchung 1

```

*****
* PROGRAM TO CLASSIFY POINTS IN IR**N *
* * *
* DATE : JANUARY 1995 *
* LANGUAGE: FORTRAN77 *
* AUTHOR : R. SEIFERT *
* * *
* FORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE *
* * *
*****

```

```

*****
ERGEBNIS DER KLASSENEINTEILUNG
*****

```

Folgender Datensatz wurde untersucht:  
c:\klassi\kneu.dat

Folgende Gruppen wurden berücksichtigt:  
Dioxine  
Furane  
Phenole  
Benzole

Wert=Testschranke: 23.80000

Anzahl der Klassen : 6

Elemente pro Klasse: 8 10 8 7 6 3

Klasse 1:	18	20	21	24	26	27	28	34		
Klasse 2:	17	19	22	30	31	32	35	38	39	40
Klasse 3:	9	10	11	12	13	14	15	16		
Klasse 4:	4	23	25	29	33	36	37			
Klasse 5:	1	2	3	5	7	8				
Klasse 6:	6	41	42							

Abbildung 2 Klasseneinteilung nach Untersuchung 2

## 8. Diskussion der Ergebnisse

Nach der Untersuchung wurde das Geheimnis um die verschiedenen Emissionsquellen gelüftet. Die Realisierungen 1-8 gehörten zu Roh- und Reingaswerten aus der Testanlage TAMARA, 9-16 zu Reingaswerten einer MVA (Müllverbrennungsanlage) A, 17-40 zu Rohgaswerten der MVA und 41 und 42 zu Reingaswerten einer MVA B.

Zu erwähnen ist an dieser Stelle, daß die Realisierungen 17 - 40 zwar zur gleichen Emissionsquelle gehören, aber aus verschiedenen Prozeßverfahren gewonnen wurden (siehe dazu mehr in /1/). Dies macht verständlich, daß diese Klasse sehr inhomogen ist. Ob man bei diesen Konstellationen überhaupt noch von einer Klasse gesprochen werden kann, ist zumindest fraglich.

Insgesamt erscheinen die Ergebnisse, die mit Hilfe des Klassifikationsverfahrens "Lernen ohne Hilfestellung", wie es im Programmpaket KLASSI realisiert ist, sehr erfolgsversprechend., da die einzelnen Emissionsquellen sehr gut entdeckt wurden und die Realisierungen weitestgehend den richtigen Klassen zugeordnet wurden. Interessant wäre es, zu untersuchen, warum die Realisierungen 4 bzw. 6 fraglich sind und warum die Realisierungen 25 und 33 nicht ihrer Klasse zugeordnet wurden. Das könnte u.U. an fehlerhaften Meßwerten (Ausreißern) oder unterschiedlichen Prozeßführungen liegen.

Des weiteren könnte man die Realisierungen 17 - 40 mit Hilfe des Klassifikationsverfahrens detaillierter untersuchen.

## 9. Zusammenfassung

Die Aufgabe, Kongenerenverteilungen einer unbekanntem Anzahl unbekannter Emissionsquellen zuzuordnen, führte zu einem Klassifikationsproblem, bei dem weder die Klassenparameter noch die Anzahl der Klassen bekannt ist. Dieses Problem kann mit den bekannten Verfahren "Lernen mit Lehrer" und "Lernen ohne Lehrer" nicht gelöst werden. Deshalb mußte ein neues Klassifikationsverfahren entwickelt werden, das sog. "Lernen ohne Hilfestellung", das auf dieses Klassifikationsproblem zugeschnitten ist. Somit unterscheidet sich diese Arbeit grundlegend von der Vorgehensweise in /1/, wo bekannte, aber nicht auf dieses Problem passende mathematische Verfahren verwendet wurden, solange sie nur Matrizen verarbeiten. Ohne Rücksicht auf den entsprechenden Kontext wurde dort nur untersucht, welche Verfahren (zufällig?) bei der speziellen Aufgabenstellung geeignete Ergebnisse liefern.

Das im Programmpaket KLASSI realisierte Verfahren "Lernen ohne Hilfestellung" lieferte bei der Untersuchung der konkreten Problemstellung gute Ergebnisse. Die unterschiedlichen Emissionsquellen konnten erkannt werden und die einzelnen Realisierungen weitestgehend den richtigen Emissionsquellen zugeordnet werden.

Das Verfahren "Lernen ohne Hilfestellung" liefert neben einer Klassifizierung auch eine Bestimmung der Klassenparameter. Dies sowie Auswertungen mit unterschiedlichen Signifikanzniveaus machen detailliertere Untersuchungen möglich. Insbesondere können Plausibilitätsbetrachtungen durchgeführt werden, die bei allen Klassifikationsproblemen unbedingt angestellt werden sollen.

## Literatur:

- /1/ "Statistische Verfahren zur Auswertung von Kongenerenverteilungen halogener, organischer Verbindungen", L. Birnbaum, K. Nagel, H. Vogg, FZKA 5584, April 1995
- /2/ "Stochastische Dynamische Systeme - Konzepte, numerische Methoden, Datenanalysen", Josef Honerkamp, Uni Freiburg
- /3/ "Der GEMUF-Test und Fragen zur Near-Real-Accountancy", Rolf Seifert, KfK 4326, November 1987

**Anhang:**

## **Anhang 1: Die zu untersuchenden Kongenerenverteilungen**

Real. Stoff

1	DIOXINE	0.07	0.15	0.33	0.23	0.22
	FURANE	0.29	0.29	0.26	0.14	0.01
	PHENOLE	0.05	0.09	0.40	0.26	0.20
	BENZOLE	0.26	0.27	0.21	0.19	0.07
2	DIOXINE	0.11	0.14	0.28	0.25	0.23
	FURANE	0.22	0.29	0.27	0.14	0.09
	PHENOLE	0.06	0.15	0.45	0.27	0.08
	BENZOLE	0.29	0.27	0.18	0.18	0.08
3	DIOXINE	0.09	0.13	0.34	0.22	0.21
	FURANE	0.13	0.34	0.31	0.17	0.04
	PHENOLE	0.02	0.04	0.60	0.18	0.16
	BENZOLE	0.25	0.24	0.22	0.20	0.09
4	DIOXINE	0.06	0.08	0.20	0.22	0.45
	FURANE	0.21	0.29	0.28	0.19	0.03
	PHENOLE	0.11	0.18	0.43	0.19	0.09
	BENZOLE	0.25	0.26	0.25	0.14	0.10
5	DIOXINE	0.12	0.17	0.23	0.20	0.28
	FURANE	0.31	0.33	0.23	0.11	0.02
	PHENOLE	0.04	0.12	0.52	0.25	0.06
	BENZOLE	0.24	0.31	0.23	0.16	0.06
6	DIOXINE	0.15	0.25	0.36	0.17	0.07
	FURANE	0.24	0.41	0.24	0.11	0.00
	PHENOLE	0.04	0.08	0.73	0.11	0.04
	BENZOLE	0.46	0.16	0.22	0.11	0.04
7	DIOXINE	0.11	0.24	0.35	0.20	0.10
	FURANE	0.28	0.36	0.23	0.12	0.02
	PHENOLE	0.03	0.08	0.72	0.10	0.06
	BENZOLE	0.33	0.24	0.18	0.21	0.04
8	DIOXINE	0.10	0.24	0.35	0.19	0.12
	FURANE	0.24	0.35	0.28	0.12	0.02
	PHENOLE	0.01	0.04	0.75	0.11	0.08
	BENZOLE	0.25	0.24	0.20	0.28	0.03
9	DIOXINE	0.25	0.30	0.21	0.14	0.10
	FURANE	0.38	0.39	0.18	0.05	0.00
	PHENOLE	0.11	0.34	0.36	0.08	0.10
	BENZOLE	0.35	0.24	0.21	0.13	0.07
10	DIOXINE	0.31	0.23	0.16	0.18	0.12
	FURANE	0.40	0.41	0.13	0.06	0.00
	PHENOLE	0.13	0.23	0.36	0.10	0.19
	BENZOLE	0.27	0.27	0.22	0.17	0.07
11	DIOXINE	0.21	0.29	0.21	0.18	0.11
	FURANE	0.38	0.35	0.19	0.06	0.00
	PHENOLE	0.08	0.21	0.43	0.17	0.11
	BENZOLE	0.25	0.30	0.25	0.16	0.04



Real. Stoff

12	DIOXINE	0.29	0.29	0.20	0.15	0.08
	FURANE	0.41	0.39	0.15	0.05	0.00
	PHENOLE	0.10	0.18	0.38	0.21	0.12
	BENZOLE	0.21	0.27	0.25	0.22	0.04
13	DIOXINE	0.21	0.30	0.21	0.16	0.12
	FURANE	0.37	0.41	0.18	0.05	0.00
	PHENOLE	0.09	0.19	0.56	0.11	0.06
	BENZOLE	0.47	0.21	0.18	0.10	0.04
14	DIOXINE	0.26	0.33	0.19	0.14	0.07
	FURANE	0.42	0.37	0.17	0.04	0.00
	PHENOLE	0.07	0.16	0.60	0.12	0.05
	BENZOLE	0.40	0.24	0.22	0.11	0.04
15	DIOXINE	0.17	0.24	0.27	0.17	0.16
	FURANE	0.43	0.37	0.14	0.06	0.00
	PHENOLE	0.05	0.13	0.44	0.24	0.13
	BENZOLE	0.24	0.28	0.25	0.18	0.05
16	DIOXINE	0.14	0.26	0.24	0.19	0.17
	FURANE	0.39	0.37	0.17	0.07	0.01
	PHENOLE	0.10	0.20	0.46	0.16	0.08
	BENZOLE	0.35	0.28	0.21	0.12	0.04
17	DIOXINE	0.07	0.12	0.35	0.24	0.23
	FURANE	0.26	0.31	0.25	0.14	0.03
	PHENOLE	0.17	0.16	0.35	0.23	0.09
	BENZOLE	0.50	0.21	0.16	0.07	0.05
18	DIOXINE	0.09	0.14	0.30	0.23	0.23
	FURANE	0.30	0.34	0.22	0.11	0.03
	PHENOLE	0.20	0.18	0.37	0.17	0.08
	BENZOLE	0.46	0.24	0.16	0.11	0.04
19	DIOXINE	0.09	0.12	0.30	0.25	0.24
	FURANE	0.25	0.27	0.27	0.16	0.04
	PHENOLE	0.18	0.15	0.42	0.18	0.07
	BENZOLE	0.51	0.21	0.15	0.09	0.04
20	DIOXINE	0.11	0.14	0.24	0.23	0.28
	FURANE	0.28	0.32	0.25	0.11	0.04
	PHENOLE	0.18	0.17	0.36	0.22	0.08
	BENZOLE	0.45	0.21	0.18	0.12	0.04
21	DIOXINE	0.09	0.12	0.26	0.26	0.27
	FURANE	0.32	0.30	0.23	0.12	0.03
	PHENOLE	0.21	0.18	0.36	0.18	0.07
	BENZOLE	0.53	0.19	0.15	0.10	0.03
22	DIOXINE	0.07	0.10	0.30	0.23	0.30
	FURANE	0.29	0.26	0.27	0.15	0.03
	PHENOLE	0.13	0.12	0.41	0.24	0.10
	BENZOLE	0.38	0.18	0.20	0.18	0.06

Real. Stoff

23	DIOXINE	0.09	0.11	0.23	0.23	0.33
	FURANE	0.28	0.28	0.26	0.14	0.04
	PHENOLE	0.17	0.15	0.39	0.20	0.08
	BENZOLE	0.72	0.11	0.09	0.07	0.02
24	DIOXINE	0.08	0.13	0.25	0.25	0.29
	FURANE	0.30	0.31	0.26	0.10	0.03
	PHENOLE	0.24	0.17	0.34	0.19	0.06
	BENZOLE	0.50	0.22	0.16	0.09	0.03
25	DIOXINE	0.03	0.06	0.15	0.25	0.51
	FURANE	0.10	0.31	0.34	0.22	0.04
	PHENOLE	0.21	0.15	0.32	0.22	0.10
	BENZOLE	0.51	0.21	0.16	0.08	0.05
26	DIOXINE	0.07	0.07	0.25	0.24	0.36
	FURANE	0.32	0.27	0.21	0.16	0.04
	PHENOLE	0.22	0.17	0.33	0.20	0.07
	BENZOLE	0.46	0.23	0.16	0.12	0.04
27	DIOXINE	0.05	0.11	0.24	0.25	0.35
	FURANE	0.31	0.31	0.23	0.10	0.06
	PHENOLE	0.19	0.19	0.40	0.16	0.06
	BENZOLE	0.45	0.24	0.18	0.10	0.04
28	DIOXINE	0.06	0.13	0.25	0.27	0.29
	FURANE	0.28	0.32	0.23	0.14	0.05
	PHENOLE	0.20	0.18	0.37	0.18	0.07
	BENZOLE	0.50	0.18	0.17	0.11	0.04
29	DIOXINE	0.05	0.13	0.25	0.27	0.30
	FURANE	0.24	0.31	0.27	0.14	0.04
	PHENOLE	0.32	0.20	0.26	0.16	0.05
	BENZOLE	0.41	0.18	0.19	0.16	0.07
30	DIOXINE	0.08	0.13	0.27	0.26	0.25
	FURANE	0.27	0.27	0.28	0.15	0.03
	PHENOLE	0.16	0.20	0.38	0.19	0.07
	BENZOLE	0.16	0.28	0.25	0.22	0.10
31	DIOXINE	0.07	0.16	0.26	0.28	0.23
	FURANE	0.26	0.32	0.27	0.12	0.03
	PHENOLE	0.24	0.16	0.31	0.22	0.07
	BENZOLE	0.37	0.18	0.19	0.18	0.08
32	DIOXINE	0.06	0.09	0.24	0.26	0.35
	FURANE	0.30	0.28	0.28	0.12	0.03
	PHENOLE	0.23	0.19	0.34	0.18	0.06
	BENZOLE	0.31	0.22	0.20	0.17	0.09
33	DIOXINE	0.02	0.06	0.18	0.28	0.46
	FURANE	0.17	0.22	0.29	0.24	0.07
	PHENOLE	0.15	0.15	0.38	0.23	0.09
	BENZOLE	0.50	0.22	0.16	0.07	0.05

Real. Stoff

34	DIOXINE	0.06	0.12	0.24	0.25	0.33
	FURANE	0.25	0.32	0.24	0.14	0.05
	PHENOLE	0.23	0.21	0.34	0.17	0.06
	BENZOLE	0.47	0.22	0.15	0.11	0.04
35	DIOXINE	0.07	0.08	0.29	0.26	0.31
	FURANE	0.29	0.23	0.27	0.17	0.04
	PHENOLE	0.17	0.17	0.42	0.17	0.07
	BENZOLE	0.41	0.25	0.18	0.12	0.04
36	DIOXINE	0.05	0.11	0.21	0.31	0.33
	FURANE	0.23	0.28	0.24	0.18	0.06
	PHENOLE	0.15	0.18	0.42	0.18	0.06
	BENZOLE	0.39	0.18	0.20	0.15	0.07
37	DIOXINE	0.06	0.12	0.23	0.29	0.30
	FURANE	0.20	0.27	0.31	0.18	0.04
	PHENOLE	0.22	0.20	0.35	0.18	0.05
	BENZOLE	0.30	0.12	0.24	0.24	0.10
38	DIOXINE	0.07	0.15	0.27	0.27	0.24
	FURANE	0.22	0.31	0.30	0.15	0.02
	PHENOLE	0.15	0.19	0.41	0.19	0.07
	BENZOLE	0.15	0.24	0.27	0.24	0.10
39	DIOXINE	0.06	0.14	0.29	0.27	0.24
	FURANE	0.21	0.30	0.30	0.16	0.03
	PHENOLE	0.17	0.20	0.39	0.18	0.07
	BENZOLE	0.29	0.16	0.22	0.23	0.09
40	DIOXINE	0.06	0.10	0.25	0.26	0.33
	FURANE	0.25	0.26	0.32	0.15	0.03
	PHENOLE	0.21	0.18	0.35	0.18	0.07
	BENZOLE	0.31	0.25	0.34	0.08	0.03
41	DIOXINE	0.12	0.13	0.37	0.24	0.14
	FURANE	0.47	0.31	0.17	0.04	0.00
	PHENOLE	0.10	0.09	0.13	0.51	0.17
	BENZOLE	0.04	0.35	0.43	0.15	0.03
42	DIOXINE	0.13	0.18	0.20	0.25	0.24
	FURANE	0.45	0.35	0.16	0.04	0.00
	PHENOLE	0.22	0.24	0.23	0.22	0.08
	BENZOLE	0.01	0.35	0.47	0.12	0.04

## **Anhang 2: Beschreibung der Klassenparameter nach Untersuchung 1**

```

*****
*   PROGRAM TO COMPUTE THE MEAN AND VARIANCES OF POINTS   *
*   IN IR**N OF SELECTED CLASSES                           *
*                                                         *
*   DATE      :   MARCH 1995                               *
*   LANGUAGE:   FORTRAN77                                   *
*   AUTHOR   :   R. SEIFERT                                 *
*                                                         *
*   FORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE                            *
*                                                         *
*****

```

```

*****
Ergebnis der Berechnung der Gruppenmittelwerte und Varianzen
*****

```

Folgender Datensatz wurde untersucht:  
c:\klassi\kneu.dat

Folgende Klasseneinteilung wurde zugrunde gelegt

```

Klasse 1
  17  18  19  20  21  22  23  24
  26  27  28  29  30  31  32  34
  35  36  37  38  39  40

```

```

Klasse 2
  9  10  11  12  13  14  15  16

```

```

Klasse 3
  1  2  3  4  5  6  7  8

```

```

Klasse 4
  25  33  41  42

```

```

Mittelwerte Klasse 1
  7.09    11.91    26.23    25.73    29.00
 26.86    29.27    26.18    14.05     3.73
 19.73    17.73    36.68    18.86     6.95
 41.05    20.45    19.05    13.91     5.64
Varianzen Klasse 1
  2.47     4.85    10.09     4.21    18.86
 12.03     7.35     8.73     5.66     1.06
 17.26     4.40    16.04     4.69     1.38
160.05    17.31    26.33    30.75     6.91

```

```

Mittelwerte Klasse 2
 23.00    28.00    21.12    16.37    11.62
 39.75    38.25    16.37     5.50     0.12
  9.12    20.50    44.87    14.87    10.50
 31.75    26.12    22.37    14.87     4.87
Varianzen Klasse 2
 34.00    11.43    10.70     3.70    12.27
  4.50     4.50     4.55     0.86     0.12
  6.12    39.14    80.41    31.55    19.71
 80.79     8.41     6.27    16.70     1.84

```

Mittelwerte Klasse 3

10.12	17.50	30.50	21.00	21.00
24.00	33.25	26.25	13.75	2.87
4.50	9.75	57.50	18.37	9.62
29.12	24.87	21.12	18.37	6.37

Varianzen Klasse 3

8.12	38.57	37.43	6.29	146.86
32.00	17.93	7.93	8.50	7.55
9.43	24.79	209.43	50.84	30.27
55.27	18.41	5.84	25.98	6.55

Mittelwerte Klasse 4

7.50	10.75	22.50	25.50	33.75
29.75	29.75	24.00	13.50	2.75
17.00	15.75	26.50	29.50	11.00
26.50	28.25	30.50	10.50	4.25

Varianzen Klasse 4

33.67	34.25	97.67	3.00	310.92
360.92	30.25	79.33	121.00	11.58
31.33	38.25	119.00	205.67	16.67
769.67	60.92	283.00	13.67	0.92

□

**Anhang 3: Tabelle der gewichteten Abstände der einzelnen Realisierungen zu den Klassen nach Untersuchung 1**

```

*****
* PROGRAM TO COMPUTE THE DISTANCE BETWEEN POINTS IN IR**N *
*   And to Compute Mean And Variances of Classes           *
*   And to Test the Trials                                 *
*                                                         *
* DATE      : JANUARY 1995                                *
* LANGUAGE:  FORTRAN77                                    *
* AUTHOR   : R. SEIFERT                                   *
*                                                         *
* FORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE                             *
*                                                         *
*****

```

```

teste Klasse 1
  durchsuche Versuch 1
    Testwert c = 188.3135
  durchsuche Versuch 2
    Testwert c = 74.3234
  durchsuche Versuch 3
    Testwert c = 197.6595
  durchsuche Versuch 4
    Testwert c = 49.8906
  durchsuche Versuch 5
    Testwert c = 87.0530
  durchsuche Versuch 6
    Testwert c = 288.4638
  durchsuche Versuch 7
    Testwert c = 217.9822
  durchsuche Versuch 8
    Testwert c = 254.8878
  durchsuche Versuch 9
    Testwert c = 408.2209
  durchsuche Versuch 10
    Testwert c = 509.7874
  durchsuche Versuch 11
    Testwert c = 252.1712
  durchsuche Versuch 12
    Testwert c = 414.4820
  durchsuche Versuch 13
    Testwert c = 294.1599
  durchsuche Versuch 14
    Testwert c = 426.3072
  durchsuche Versuch 15
    Testwert c = 228.5824
  durchsuche Versuch 16
    Testwert c = 143.7861
  durchsuche Versuch 17
    Testwert c = 21.8498
  durchsuche Versuch 18
    Testwert c = 18.9393
  durchsuche Versuch 19
    Testwert c = 12.3691
  durchsuche Versuch 20
    Testwert c = 16.2894

```



durchsuche Versuch	21	
Testwert c =		9.8263
durchsuche Versuch	22	
Testwert c =		31.1878
durchsuche Versuch	23	
Testwert c =		27.6882
durchsuche Versuch	24	
Testwert c =		10.5566
durchsuche Versuch	25	
Testwert c =		108.7194
durchsuche Versuch	26	
Testwert c =		18.0771
durchsuche Versuch	27	
Testwert c =		20.4534
durchsuche Versuch	28	
Testwert c =		6.9196
durchsuche Versuch	29	
Testwert c =		26.0938
durchsuche Versuch	30	
Testwert c =		18.7785
durchsuche Versuch	31	
Testwert c =		16.6395
durchsuche Versuch	32	
Testwert c =		12.3037
durchsuche Versuch	33	
Testwert c =		97.1166
durchsuche Versuch	34	
Testwert c =		11.8552
durchsuche Versuch	35	
Testwert c =		16.3606
durchsuche Versuch	36	
Testwert c =		26.3181
durchsuche Versuch	37	
Testwert c =		30.6481
durchsuche Versuch	38	
Testwert c =		27.0270
durchsuche Versuch	39	
Testwert c =		18.4245
durchsuche Versuch	40	
Testwert c =		21.4389
durchsuche Versuch	41	
Testwert c =		503.7363
durchsuche Versuch	42	
Testwert c =		177.9795

```

teste Klasse 2
  durchsuche Versuch 1
    Testwert c = 230.9481
  durchsuche Versuch 2
    Testwert c = 927.9712
  durchsuche Versuch 3
    Testwert c = 577.8901
  durchsuche Versuch 4
    Testwert c = 568.3450
  durchsuche Versuch 5
    Testwert c = 152.7812
  durchsuche Versuch 6
    Testwert c = 166.8601
  durchsuche Versuch 7
    Testwert c = 174.7688
  durchsuche Versuch 8
    Testwert c = 236.0658
  durchsuche Versuch 9
    Testwert c = 15.3617
  durchsuche Versuch 10
    Testwert c = 22.9965
  durchsuche Versuch 11
    Testwert c = 10.2709
  durchsuche Versuch 12
    Testwert c = 12.3937
  durchsuche Versuch 13
    Testwert c = 18.8489
  durchsuche Versuch 14
    Testwert c = 19.0267
  durchsuche Versuch 15
    Testwert c = 21.7423
  durchsuche Versuch 16
    Testwert c = 19.6262
  durchsuche Versuch 17
    Testwert c = 328.9285
  durchsuche Versuch 18
    Testwert c = 220.6773
  durchsuche Versuch 19
    Testwert c = 456.6425
  durchsuche Versuch 20
    Testwert c = 297.6077
  durchsuche Versuch 21
    Testwert c = 279.8430
  durchsuche Versuch 22
    Testwert c = 358.2291
  durchsuche Versuch 23
    Testwert c = 460.8183
  durchsuche Versuch 24
    Testwert c = 274.4160
  durchsuche Versuch 25
    Testwert c = 967.3513
  durchsuche Versuch 26
    Testwert c = 453.2050
  durchsuche Versuch 27
    Testwert c = 475.2444

```

durchsuche Versuch	28	
Testwert c =		455.3108
durchsuche Versuch	29	
Testwert c =		494.5993
durchsuche Versuch	30	
Testwert c =		368.6576
durchsuche Versuch	31	
Testwert c =		320.4658
durchsuche Versuch	32	
Testwert c =		349.7266
durchsuche Versuch	33	
Testwert c =		1215.8323
durchsuche Versuch	34	
Testwert c =		490.3374
durchsuche Versuch	35	
Testwert c =		501.9157
durchsuche Versuch	36	
Testwert c =		717.3148
durchsuche Versuch	37	
Testwert c =		644.4915
durchsuche Versuch	38	
Testwert c =		359.2722
durchsuche Versuch	39	
Testwert c =		442.9136
durchsuche Versuch	40	
Testwert c =		461.8384
durchsuche Versuch	41	
Testwert c =		237.5352
durchsuche Versuch	42	
Testwert c =		209.6994

```

teste Klasse 3
  durchsuche Versuch 1
    Testwert c = 11.1546
  durchsuche Versuch 2
    Testwert c = 15.3112
  durchsuche Versuch 3
    Testwert c = 14.2482
  durchsuche Versuch 4
    Testwert c = 30.3281
  durchsuche Versuch 5
    Testwert c = 11.3243
  durchsuche Versuch 6
    Testwert c = 30.9654
  durchsuche Versuch 7
    Testwert c = 11.7101
  durchsuche Versuch 8
    Testwert c = 14.9598
  durchsuche Versuch 9
    Testwert c = 103.3633
  durchsuche Versuch 10
    Testwert c = 125.5500
  durchsuche Versuch 11
    Testwert c = 56.5075
  durchsuche Versuch 12
    Testwert c = 107.5545
  durchsuche Versuch 13
    Testwert c = 71.8085
  durchsuche Versuch 14
    Testwert c = 92.9521
  durchsuche Versuch 15
    Testwert c = 55.3119
  durchsuche Versuch 16
    Testwert c = 41.8838
  durchsuche Versuch 17
    Testwert c = 44.0459
  durchsuche Versuch 18
    Testwert c = 48.4545
  durchsuche Versuch 19
    Testwert c = 48.5367
  durchsuche Versuch 20
    Testwert c = 37.8167
  durchsuche Versuch 21
    Testwert c = 67.0690
  durchsuche Versuch 22
    Testwert c = 21.8466
  durchsuche Versuch 23
    Testwert c = 102.8070
  durchsuche Versuch 24
    Testwert c = 71.3970
  durchsuche Versuch 25
    Testwert c = 98.6616
  durchsuche Versuch 26
    Testwert c = 66.2424
  durchsuche Versuch 27
    Testwert c = 53.0062

```

durchsuche Versuch	28	
Testwert c =		58.8756
durchsuche Versuch	29	
Testwert c =		107.5176
durchsuche Versuch	30	
Testwert c =		37.5775
durchsuche Versuch	31	
Testwert c =		60.8670
durchsuche Versuch	32	
Testwert c =		58.4847
durchsuche Versuch	33	
Testwert c =		85.0724
durchsuche Versuch	34	
Testwert c =		68.9920
durchsuche Versuch	35	
Testwert c =		43.1192
durchsuche Versuch	36	
Testwert c =		50.3053
durchsuche Versuch	37	
Testwert c =		76.4244
durchsuche Versuch	38	
Testwert c =		39.4154
durchsuche Versuch	39	
Testwert c =		40.4531
durchsuche Versuch	40	
Testwert c =		85.2377
durchsuche Versuch	41	
Testwert c =		180.2964
durchsuche Versuch	42	
Testwert c =		229.7382

teste Klasse	4	
durchsuche Versuch	1	
Testwert c =		30.6159
durchsuche Versuch	2	
Testwert c =		32.4200
durchsuche Versuch	3	
Testwert c =		62.4489
durchsuche Versuch	4	
Testwert c =		46.9016
durchsuche Versuch	5	
Testwert c =		31.0975
durchsuche Versuch	6	
Testwert c =		73.8674
durchsuche Versuch	7	
Testwert c =		57.9750
durchsuche Versuch	8	
Testwert c =		82.3295
durchsuche Versuch	9	
Testwert c =		92.8657
durchsuche Versuch	10	
Testwert c =		68.5289
durchsuche Versuch	11	
Testwert c =		46.9021
durchsuche Versuch	12	
Testwert c =		80.9835
durchsuche Versuch	13	
Testwert c =		68.7364
durchsuche Versuch	14	
Testwert c =		92.4469
durchsuche Versuch	15	
Testwert c =		50.3097
durchsuche Versuch	16	
Testwert c =		33.5636
durchsuche Versuch	17	
Testwert c =		7.7701
durchsuche Versuch	18	
Testwert c =		8.3763
durchsuche Versuch	19	
Testwert c =		8.0825
durchsuche Versuch	20	
Testwert c =		6.9966
durchsuche Versuch	21	
Testwert c =		8.4072
durchsuche Versuch	22	
Testwert c =		15.9141
durchsuche Versuch	23	
Testwert c =		20.3664
durchsuche Versuch	24	
Testwert c =		8.6619
durchsuche Versuch	25	
Testwert c =		10.5688
durchsuche Versuch	26	
Testwert c =		6.3268
durchsuche Versuch	27	
Testwert c =		7.0815

durchsuche Versuch	28	
Testwert c =		7.8501
durchsuche Versuch	29	
Testwert c =		25.1861
durchsuche Versuch	30	
Testwert c =		50.1633
durchsuche Versuch	31	
Testwert c =		28.4408
durchsuche Versuch	32	
Testwert c =		33.3076
durchsuche Versuch	33	
Testwert c =		14.8608
durchsuche Versuch	34	
Testwert c =		7.6139
durchsuche Versuch	35	
Testwert c =		7.6363
durchsuche Versuch	36	
Testwert c =		28.0429
durchsuche Versuch	37	
Testwert c =		64.1262
durchsuche Versuch	38	
Testwert c =		55.9846
durchsuche Versuch	39	
Testwert c =		44.6580
durchsuche Versuch	40	
Testwert c =		6.8421
durchsuche Versuch	41	
Testwert c =		21.6304
durchsuche Versuch	42	
Testwert c =		12.9284

Folgender Datensatz wurde untersucht:  
c:\klassi\kneu.dat

Folgende Gruppen wurden beruecksichtigt:  
Dioxine  
Furane  
Phenole  
Benzole

□

## **Anhang 4: Beschreibung der Klassenparameter nach Untersuchung 2**



```

*****
* PROGRAM TO COMPUTE THE MEAN AND VARIANCES OF POINTS *
* IN IR**N OF SELECTED CLASSES *
* *
* DATE : MARCH 1995 *
* LANGUAGE: FORTRAN77 *
* AUTHOR : R. SEIFERT *
* *
* FORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE *
* *
*****

```

```

*****
Ergebnis der Berechnung der Gruppenmittelwerte und Varianzen
*****

```

Folgender Datensatz wurde untersucht:  
c:\klassi\kneu.dat

Folgende Klasseneinteilung wurde zugrunde gelegt

```

Klasse 1
  18  20  21  24  26  27  28  34

Klasse 2
  17  19  22  30  31  32  35  38
  39  40

Klasse 3
  9  10  11  12  13  14  15  16

Klasse 4
  4  23  25  29  33  36  37

Klasse 5
  1  2  3  5  7  8

Klasse 6
  6  41  42

```

```

Mittelwerte Klasse 1
  7.62  12.00  25.37  24.75  30.00
 29.50  31.12  23.37  12.25  4.12
 20.87  18.12  35.87  18.37  6.87
 47.75  21.62  16.37  10.75  3.75

Varianzen Klasse 1
  3.98  5.14  3.98  1.93  19.14
  5.71  4.12  2.55  4.79  1.27
  4.12  1.84  4.98  3.70  0.70
  8.50  4.84  1.41  1.07  0.21

```

Mittelwerte Klasse 2					
7.00	11.90	28.20	25.80	27.20	
26.00	28.10	28.10	14.70	3.10	
18.10	17.20	37.80	19.60	7.40	
33.90	21.80	21.60	15.80	6.80	
Varianzen Klasse 2					
0.89	6.99	9.96	2.18	20.84	
8.67	8.10	4.10	2.68	0.32	
12.32	6.40	14.84	6.04	1.38	
149.66	14.18	32.71	40.84	7.29	
Mittelwerte Klasse 3					
23.00	28.00	21.12	16.37	11.62	
39.75	38.25	16.37	5.50	0.12	
9.12	20.50	44.87	14.87	10.50	
31.75	26.12	22.37	14.87	4.87	
Varianzen Klasse 3					
34.00	11.43	10.70	3.70	12.27	
4.50	4.50	4.55	0.86	0.12	
6.12	39.14	80.41	31.55	19.71	
80.79	8.41	6.27	16.70	1.84	
Mittelwerte Klasse 4					
5.14	9.57	20.71	26.43	38.29	
20.43	28.00	28.43	18.43	4.57	
19.00	17.29	36.43	19.43	7.43	
44.00	18.29	18.43	13.00	6.57	
Varianzen Klasse 4					
5.14	8.29	11.57	10.62	76.57	
32.95	9.33	10.95	13.95	1.95	
47.00	5.24	35.62	5.95	4.29	
243.33	28.90	29.62	38.67	8.29	
Mittelwerte Klasse 5					
10.00	17.83	31.33	21.50	19.33	
24.50	32.67	26.33	13.33	3.33	
3.50	8.67	57.33	19.50	10.67	
27.00	26.17	20.33	20.33	6.17	
Varianzen Klasse 5					
3.20	24.57	23.47	5.10	47.87	
42.70	9.07	9.47	4.67	8.67	
3.50	19.07	203.07	58.70	34.67	
11.60	7.77	4.27	17.07	5.37	
Mittelwerte Klasse 6					
13.33	18.67	31.00	22.00	15.00	
38.67	35.67	19.00	6.33	0.00	
12.00	13.67	36.33	28.00	9.67	
17.00	28.67	37.33	12.67	3.67	
Varianzen Klasse 6					
2.33	36.33	91.00	19.00	73.00	
162.33	25.33	19.00	16.33	0.00	
84.00	80.33	1033.33	427.00	44.33	
633.00	120.33	180.33	4.33	0.33	

**Anhang 5: Tabelle der gewichteten Abstände der einzelnen Realisierungen zu den Klassen nach Untersuchung 2**

```

*****
* PROGRAM TO COMPUTE THE DISTANCE BETWEEN POINTS IN IR**N *
*   And to Compute Mean And Variances of Classes           *
*   And to Test the Trials                                 *
*                                                         *
* DATE      : JANUARY 1995                                *
* LANGUAGE:  FORTRAN77                                    *
* AUTHOR   :  R. SEIFERT                                  *
*                                                         *
* FORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE                             *
*                                                         *
*****

```

```

teste Klasse 1
  durchsuche Versuch 1
    Testwert c = 596.0769
  durchsuche Versuch 2
    Testwert c = 325.4909
  durchsuche Versuch 3
    Testwert c = 831.3552
  durchsuche Versuch 4
    Testwert c = 413.3488
  durchsuche Versuch 5
    Testwert c = 348.3843
  durchsuche Versuch 6
    Testwert c = 634.2930
  durchsuche Versuch 7
    Testwert c = 639.0013
  durchsuche Versuch 8
    Testwert c = 988.0389
  durchsuche Versuch 9
    Testwert c = 582.1636
  durchsuche Versuch 10
    Testwert c = 753.2001
  durchsuche Versuch 11
    Testwert c = 427.8601
  durchsuche Versuch 12
    Testwert c = 673.5366
  durchsuche Versuch 13
    Testwert c = 373.2062
  durchsuche Versuch 14
    Testwert c = 560.7222
  durchsuche Versuch 15
    Testwert c = 523.4638
  durchsuche Versuch 16
    Testwert c = 227.3648
  durchsuche Versuch 17
    Testwert c = 70.9266
  durchsuche Versuch 18
    Testwert c = 19.6598
  durchsuche Versuch 19
    Testwert c = 44.2682
  durchsuche Versuch 20
    Testwert c = 20.5587
  durchsuche Versuch 21
    Testwert c = 13.5843
  durchsuche Versuch 22
    Testwert c = 181.6915

```

durchsuche Versuch	23	
Testwert c =		182.4312
durchsuche Versuch	24	
Testwert c =		16.3679
durchsuche Versuch	25	
Testwert c =		235.0126
durchsuche Versuch	26	
Testwert c =		23.5282
durchsuche Versuch	27	
Testwert c =		20.0823
durchsuche Versuch	28	
Testwert c =		9.8982
durchsuche Versuch	29	
Testwert c =		162.7898
durchsuche Versuch	30	
Testwert c =		512.0424
durchsuche Versuch	31	
Testwert c =		189.3564
durchsuche Versuch	32	
Testwert c =		230.2936
durchsuche Versuch	33	
Testwert c =		190.9169
durchsuche Versuch	34	
Testwert c =		16.4557
durchsuche Versuch	35	
Testwert c =		57.0752
durchsuche Versuch	36	
Testwert c =		152.3041
durchsuche Versuch	37	
Testwert c =		516.0789
durchsuche Versuch	38	
Testwert c =		611.0123
durchsuche Versuch	39	
Testwert c =		392.8174
durchsuche Versuch	40	
Testwert c =		310.2107
durchsuche Versuch	41	
Testwert c =		1547.7371
durchsuche Versuch	42	
Testwert c =		1137.0457

teste Klasse	2		
durchsuche Versuch	1		
Testwert c =		173.9375	
durchsuche Versuch	2		
Testwert c =		159.1973	
durchsuche Versuch	3		
Testwert c =		184.3242	
durchsuche Versuch	4		
Testwert c =		53.3335	
durchsuche Versuch	5		
Testwert c =		118.0392	
durchsuche Versuch	6		
Testwert c =		356.3896	
durchsuche Versuch	7		
Testwert c =		223.9124	
durchsuche Versuch	8		
Testwert c =		244.1312	
durchsuche Versuch	9		
Testwert c =		691.6269	
durchsuche Versuch	10		
Testwert c =		998.4152	
durchsuche Versuch	11		
Testwert c =		438.2915	
durchsuche Versuch	12		
Testwert c =		837.6874	
durchsuche Versuch	13		
Testwert c =		498.6610	
durchsuche Versuch	14		
Testwert c =		762.7756	
durchsuche Versuch	15		
Testwert c =		374.3562	
durchsuche Versuch	16		
Testwert c =		224.3468	
durchsuche Versuch	17		
Testwert c =		20.2699	
durchsuche Versuch	18		
Testwert c =		35.9856	
durchsuche Versuch	19		
Testwert c =		17.3516	
durchsuche Versuch	20		
Testwert c =		40.4626	
durchsuche Versuch	21		
Testwert c =		27.3627	
durchsuche Versuch	22		
Testwert c =		23.3020	
durchsuche Versuch	23		
Testwert c =		45.8621	
durchsuche Versuch	24		
Testwert c =		26.0982	
durchsuche Versuch	25		
Testwert c =		143.8465	
durchsuche Versuch	26		
Testwert c =		35.8272	
durchsuche Versuch	27		
Testwert c =		62.3079	
durchsuche Versuch	28		
Testwert c =		29.3007	
durchsuche Versuch	29		
Testwert c =		45.4195	

durchsuche Versuch	30	
Testwert c =		11.3361
durchsuche Versuch	31	
Testwert c =		19.7230
durchsuche Versuch	32	
Testwert c =		17.7448
durchsuche Versuch	33	
Testwert c =		166.9753
durchsuche Versuch	34	
Testwert c =		34.1995
durchsuche Versuch	35	
Testwert c =		17.4134
durchsuche Versuch	36	
Testwert c =		64.5213
durchsuche Versuch	37	
Testwert c =		39.5482
durchsuche Versuch	38	
Testwert c =		19.0729
durchsuche Versuch	39	
Testwert c =		14.2732
durchsuche Versuch	40	
Testwert c =		19.5354
durchsuche Versuch	41	
Testwert c =		522.1470
durchsuche Versuch	42	
Testwert c =		274.3925

teste Klasse	3	
durchsuche Versuch	1	
Testwert c =		230.9481
durchsuche Versuch	2	
Testwert c =		927.9712
durchsuche Versuch	3	
Testwert c =		577.8901
durchsuche Versuch	4	
Testwert c =		568.3450
durchsuche Versuch	5	
Testwert c =		152.7812
durchsuche Versuch	6	
Testwert c =		166.8601
durchsuche Versuch	7	
Testwert c =		174.7688
durchsuche Versuch	8	
Testwert c =		236.0658
durchsuche Versuch	9	
Testwert c =		15.3617
durchsuche Versuch	10	
Testwert c =		22.9965
durchsuche Versuch	11	
Testwert c =		10.2709
durchsuche Versuch	12	
Testwert c =		12.3937
durchsuche Versuch	13	
Testwert c =		18.8489
durchsuche Versuch	14	
Testwert c =		19.0267
durchsuche Versuch	15	
Testwert c =		21.7423
durchsuche Versuch	16	
Testwert c =		19.6262
durchsuche Versuch	17	
Testwert c =		328.9285
durchsuche Versuch	18	
Testwert c =		220.6773
durchsuche Versuch	19	
Testwert c =		456.6425
durchsuche Versuch	20	
Testwert c =		297.6077
durchsuche Versuch	21	
Testwert c =		279.8430
durchsuche Versuch	22	
Testwert c =		358.2291
durchsuche Versuch	23	
Testwert c =		460.8183
durchsuche Versuch	24	
Testwert c =		274.4160
durchsuche Versuch	25	
Testwert c =		967.3513
durchsuche Versuch	26	
Testwert c =		453.2050
durchsuche Versuch	27	
Testwert c =		475.2444
durchsuche Versuch	28	
Testwert c =		455.3108
durchsuche Versuch	29	
Testwert c =		494.5993



durchsuche Versuch	30	
Testwert c =		368.6576
durchsuche Versuch	31	
Testwert c =		320.4658
durchsuche Versuch	32	
Testwert c =		349.7266
durchsuche Versuch	33	
Testwert c =		1215.8323
durchsuche Versuch	34	
Testwert c =		490.3374
durchsuche Versuch	35	
Testwert c =		501.9157
durchsuche Versuch	36	
Testwert c =		717.3148
durchsuche Versuch	37	
Testwert c =		644.4915
durchsuche Versuch	38	
Testwert c =		359.2722
durchsuche Versuch	39	
Testwert c =		442.9136
durchsuche Versuch	40	
Testwert c =		461.8384
durchsuche Versuch	41	
Testwert c =		237.5352
durchsuche Versuch	42	
Testwert c =		209.6994

teste Klasse	4		
durchsuche Versuch	1		
Testwert c =		99.5378	
durchsuche Versuch	2		
Testwert c =		49.5411	
durchsuche Versuch	3		
Testwert c =		109.7235	
durchsuche Versuch	4		
Testwert c =		14.0601	
durchsuche Versuch	5		
Testwert c =		68.4866	
durchsuche Versuch	6		
Testwert c =		198.9772	
durchsuche Versuch	7		
Testwert c =		158.3782	
durchsuche Versuch	8		
Testwert c =		178.0286	
durchsuche Versuch	9		
Testwert c =		287.8604	
durchsuche Versuch	10		
Testwert c =		300.5847	
durchsuche Versuch	11		
Testwert c =		174.5217	
durchsuche Versuch	12		
Testwert c =		262.8668	
durchsuche Versuch	13		
Testwert c =		205.7684	
durchsuche Versuch	14		
Testwert c =		270.9920	
durchsuche Versuch	15		
Testwert c =		163.0490	
durchsuche Versuch	16		
Testwert c =		119.2579	
durchsuche Versuch	17		
Testwert c =		33.3019	
durchsuche Versuch	18		
Testwert c =		35.9605	
durchsuche Versuch	19		
Testwert c =		19.7905	
durchsuche Versuch	20		
Testwert c =		23.4421	
durchsuche Versuch	21		
Testwert c =		22.2147	
durchsuche Versuch	22		
Testwert c =		27.7741	
durchsuche Versuch	23		
Testwert c =		21.8387	
durchsuche Versuch	24		
Testwert c =		20.5588	
durchsuche Versuch	25		
Testwert c =		21.6135	
durchsuche Versuch	26		
Testwert c =		15.9278	
durchsuche Versuch	27		
Testwert c =		20.2487	
durchsuche Versuch	28		
Testwert c =		13.5933	
durchsuche Versuch	29		
Testwert c =		18.7643	

durchsuche Versuch	30	
Testwert c =		25.4876
durchsuche Versuch	31	
Testwert c =		22.3743
durchsuche Versuch	32	
Testwert c =		12.5663
durchsuche Versuch	33	
Testwert c =		20.7750
durchsuche Versuch	34	
Testwert c =		14.4050
durchsuche Versuch	35	
Testwert c =		17.4616
durchsuche Versuch	36	
Testwert c =		8.0870
durchsuche Versuch	37	
Testwert c =		14.8654
durchsuche Versuch	38	
Testwert c =		29.0129
durchsuche Versuch	39	
Testwert c =		20.3931
durchsuche Versuch	40	
Testwert c =		19.7200
durchsuche Versuch	41	
Testwert c =		359.0940
durchsuche Versuch	42	
Testwert c =		147.4882

teste Klasse 5		
durchsuche Versuch	1	
Testwert c =		12.4104
durchsuche Versuch	2	
Testwert c =		17.9942
durchsuche Versuch	3	
Testwert c =		15.9852
durchsuche Versuch	4	
Testwert c =		69.4468
durchsuche Versuch	5	
Testwert c =		18.2737
durchsuche Versuch	6	
Testwert c =		83.5313
durchsuche Versuch	7	
Testwert c =		17.1640
durchsuche Versuch	8	
Testwert c =		18.1502
durchsuche Versuch	9	
Testwert c =		189.6125
durchsuche Versuch	10	
Testwert c =		241.1151
durchsuche Versuch	11	
Testwert c =		98.8072
durchsuche Versuch	12	
Testwert c =		202.7177
durchsuche Versuch	13	
Testwert c =		152.6446
durchsuche Versuch	14	
Testwert c =		178.4422
durchsuche Versuch	15	
Testwert c =		70.6731
durchsuche Versuch	16	
Testwert c =		67.5787
durchsuche Versuch	17	
Testwert c =		128.6644
durchsuche Versuch	18	
Testwert c =		132.5576
durchsuche Versuch	19	
Testwert c =		141.7069
durchsuche Versuch	20	
Testwert c =		110.7946
durchsuche Versuch	21	
Testwert c =		186.1713
durchsuche Versuch	22	
Testwert c =		61.6479
durchsuche Versuch	23	
Testwert c =		316.2974
durchsuche Versuch	24	
Testwert c =		200.3239
durchsuche Versuch	25	
Testwert c =		242.8435
durchsuche Versuch	26	
Testwert c =		172.2428
durchsuche Versuch	27	
Testwert c =		138.6883
durchsuche Versuch	28	
Testwert c =		165.0466
durchsuche Versuch	29	
Testwert c =		291.1881

durchsuche Versuch	30	
Testwert c =		84.7073
durchsuche Versuch	31	
Testwert c =		158.6308
durchsuche Versuch	32	
Testwert c =		146.7314
durchsuche Versuch	33	
Testwert c =		201.8771
durchsuche Versuch	34	
Testwert c =		185.4058
durchsuche Versuch	35	
Testwert c =		108.2077
durchsuche Versuch	36	
Testwert c =		111.3777
durchsuche Versuch	37	
Testwert c =		175.0217
durchsuche Versuch	38	
Testwert c =		85.0483
durchsuche Versuch	39	
Testwert c =		93.3521
durchsuche Versuch	40	
Testwert c =		177.0354
durchsuche Versuch	41	
Testwert c =		266.0082
durchsuche Versuch	42	
Testwert c =		408.8238

```

teste Klasse 6
  durchsuche Versuch 1
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 2
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 3
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 4
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 5
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 6
    Testwert c = 18.6711
  durchsuche Versuch 7
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 8
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 9
    Testwert c = 109.2910
  durchsuche Versuch 10
    Testwert c = 184.2269
  durchsuche Versuch 11
    Testwert c = 35.4485
  durchsuche Versuch 12
    Testwert c = 136.1706
  durchsuche Versuch 13
    Testwert c = 40.9735
  durchsuche Versuch 14
    Testwert c = 86.3507
  durchsuche Versuch 15
    Testwert c = 23.3546
  durchsuche Versuch 16
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 17
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 18
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 19
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 20
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 21
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 22
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 23
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 24
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 25
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 26
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 27
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 28
    Testwert c = 9999.9902
  durchsuche Versuch 29
    Testwert c = 9999.9902

```

durchsuche Versuch	30	
Testwert c =		9999.9902
durchsuche Versuch	31	
Testwert c =		9999.9902
durchsuche Versuch	32	
Testwert c =		9999.9902
durchsuche Versuch	33	
Testwert c =		9999.9902
durchsuche Versuch	34	
Testwert c =		9999.9902
durchsuche Versuch	35	
Testwert c =		9999.9902
durchsuche Versuch	36	
Testwert c =		9999.9902
durchsuche Versuch	37	
Testwert c =		9999.9902
durchsuche Versuch	38	
Testwert c =		9999.9902
durchsuche Versuch	39	
Testwert c =		9999.9902
durchsuche Versuch	40	
Testwert c =		9999.9902
durchsuche Versuch	41	
Testwert c =		10.7844
durchsuche Versuch	42	
Testwert c =		8.5704

Folgender Datensatz wurde untersucht:  
c:\klassi\kneu.dat

Folgende Gruppen wurden beruecksichtigt:  
Dioxine  
Furane  
Phenole  
Benzole

□