

Online-Überwachung von Chlor und Chlordioxid mittels optischer Spektroskopie

Machine Learning in der Überwachung der Trinkwasserqualität

Martin Wagner,¹ Averil Fernandes,² Gabriele Nüske³

Abstract: In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, wie UV/VIS-Spektren, die für die Überwachung von Desinfektionsmittelrestgehalten im Trinkwasser mit einem online-Spektrometer aufgenommen werden, mit Methoden des maschinellen Lernens ausgewertet werden. Es wurden Regression-Pipelines für die Bestimmung der Konzentration von freiem Chlor und Chlordioxid in Trinkwasser im Bereich zwischen 0,1 mg/L und 1,0 mg/L erstellt. Der Root Mean Squared Error (RMSE) der Kalibrierung beträgt 0,03 mg/L (Chlordioxid) und 0,05 mg/L (freies Chlor). Die Anwendung der Methode wird am Beispiel einer Desinfektionsanlage in Haridwar, Indien, demonstriert.

Keywords: Freies Chlor; Chlordioxid; UV/VIS Spektroskopie; online; Überwachung; Principal Components Analysis; Linear Regression; Neural Network; Machine Learning

1 Einleitung

Die Desinfektion von Wasser ist weltweit ein wichtiges Thema. Vor allem Trinkwasser, das aus Oberflächenwasser gewonnen wird, muss mittels Chlor, Chlordioxid oder UV-Desinfektion behandelt werden, um Bakterien und Viren zu inaktivieren. Ein bedeutender Aspekt ist dabei die Überwachung des Prozesses um jederzeit eine sichere Desinfektion gewährleisten zu können.

Die Trinkwasseraufbereitung erfolgt in mehreren Stufen und variiert von der Art der Wasserquelle (Grundwasser, Flusswasser, Talsperre, Uferfiltrat, etc.) und der Wasserqualität. Die Überwachung der Wasserqualität erfolgt dabei sowohl direkt vor Ort mittels online- und onsite-Messgeräten als auch im Labor. Online werden vor allem einfach zu bestimmende Parameter, wie das Redoxpotential, die elektrische Leitfähigkeit und die Trübung ermittelt. Komplexere Parameter wie organische Spurenstoffe (z. B. Arzneimittelrückstände) und mikrobiologische Parameter werden in regelmäßigen Abständen im Labor bestimmt.

¹ TZW: DVGW-Technologiezentrum Wasser, Außenstelle Dresden, Wasserwerkstr. 2, 01326 Dresden, Deutschland, martin.wagner@tzw.de

² TZW: DVGW-Technologiezentrum Wasser, Außenstelle Dresden, Wasserwerkstr. 2, 01326 Dresden, Deutschland

³ TZW: DVGW-Technologiezentrum Wasser, Außenstelle Dresden, Wasserwerkstr. 2, 01326 Dresden, Deutschland, gabriele.nueske@tzw.de

Die initial zugegebene Konzentration von Desinfektionsmitteln wie Chlor oder Chlordioxid verringert sich über die Zeit durch die Reaktion mit Wasserinhaltsstoffen. Die Dosierung erfolgt in der Praxis daher so, dass eine bestimmte Restkonzentration nach einer Reaktionszeit von 30 min eingehalten wird. Die vorgeschriebene Restkonzentration beträgt in Deutschland zwischen 0,1 mg/L und 0,3 mg/L für Chlor sowie zwischen 0,05 mg/L und 0,20 mg/L für Chlordioxid. In anderen Ländern werden dagegen durchaus höhere Restkonzentrationen gefordert.

Die Online-Überwachung von Desinfektionsmittelrestgehalten, wie Chlor und Chlordioxid, erfolgt in der Regel mittels amperometrischen (elektrochemischen) Sensoren. Die optische Spektroskopie wurde bisher für die Überwachung von Desinfektionsmittelrestgehalten noch nicht verwendet. Der Vorteil ist jedoch, dass mit einem Spektrometer neben dem Desinfektionsmittel auch eine Vielzahl weiterer Wasserqualitätsparameter erfasst werden können. Dazu gehören die Trübung, Nitrat sowie die Summe der gelösten organischen Verbindungen (DOC, Dissolved Organic Carbon). In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, wie Restgehalte von freiem Chlor und Chlordioxid quantitativ ermittelt werden können.

Die Herausforderung für die Bestimmung von Chlor und Chlordioxid mittels UV/VIS-Spektren besteht darin, die schwachen Absorptionssignale der vergleichsweise niedrigen Restgehalte zu erfassen und vom Hintergrund (durch natürliche Wasserinhaltsstoffe hervorgerufene Absorption) zu trennen (siehe Abb. 1). Dies wurde in dieser Arbeit durch die Anwendung von Verfahren des maschinellen Lernens erzielt.

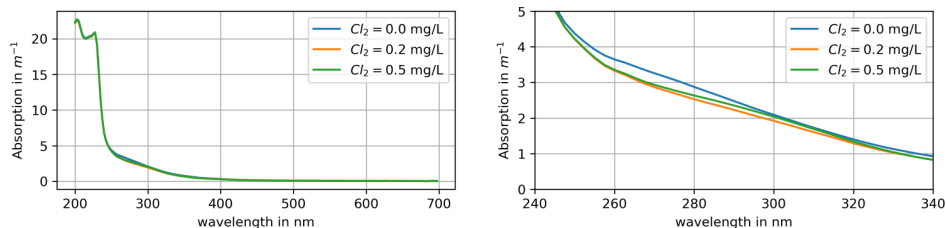


Abb. 1: UV/VIS-Spektren einer Wasserprobe mit unterschiedlichen Chlorkonzentrationen. Links: das vollständige Spektrum, welches hauptsächlich durch Nitrat und DOC geprägt ist. Rechts: Vergrößerung des Wellenlängenbereiches zwischen 240 nm und 340 nm, in welchem Chlor absorbiert.

Chlor liegt im Wasser in Abhängigkeit des pH-Wertes in den drei verschiedenen Formen Cl_2 (sauer), $HOCl$ (neutral) und OCl^- (basisch) vor. Der zulässige pH-Wert Bereich von Trinkwässern in Deutschland liegt zwischen 6,5 und 9,5, so dass nur die beiden Spezies hypochlorige Säure ($HOCl$) und Hypochlorit (OCl^-) von Bedeutung sind. Beide weisen unterschiedliche Absorptionseigenschaften auf, dargestellt in Abb. 2.

Im Gegensatz zu Chlor ist Chlordioxid im trinkwasserrelevanten Bereich unabhängig vom pH-Wert. Die Absorption ist daher direkt von der Konzentration abhängig.

Die quantitative Analyse von Spektren durch multivariate Datenanalysemethoden ist bereits

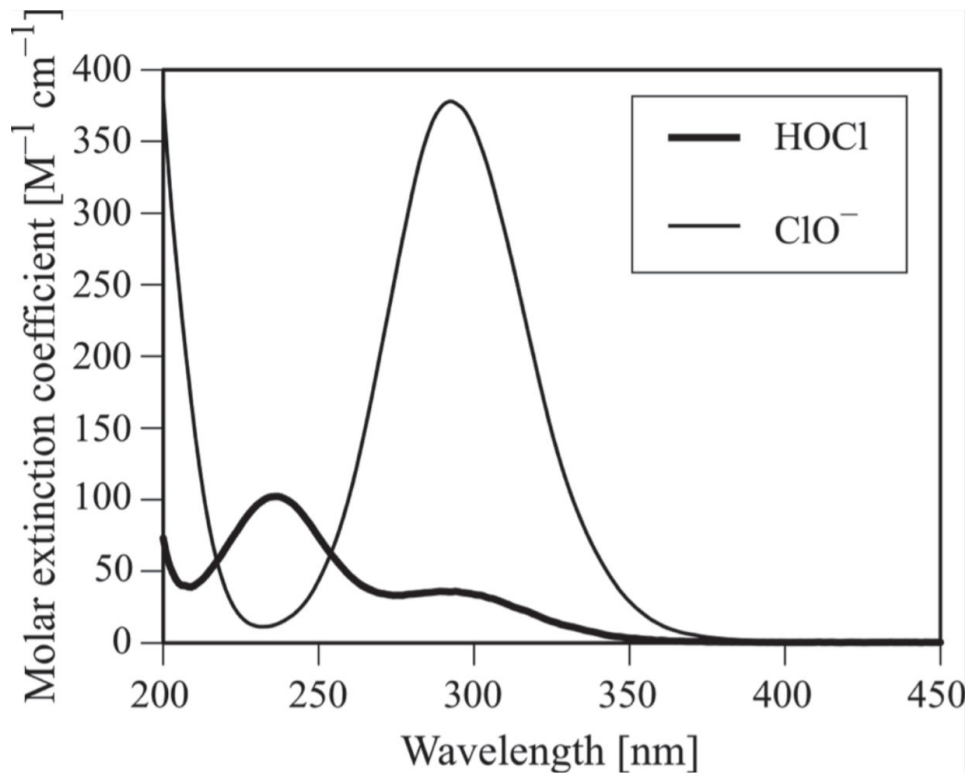


Abb. 2: UV/VIS-Spektren von HOCl und ClO^- . [Ki19].

seit vielen Jahren gängige Praxis. Standardmethoden sind hier die Hauptkomponentenanalyse zur Dimensionsreduktion in Kombination mit einer einfachen multiplen linearen Regression (Principal Components Regression, PCR). Ein weiteres Standardverfahren stellt darüber hinaus die Partial Least Squares Regression (PLSR) dar [Ke06].

Die spektroskopische Bestimmung von Chlor und Chlordioxid erfolgte bisher nur für hochkonzentrierte Stammlösungen im Bereich zwischen 20 mg/L und 100 mg/L (Chlordioxid) bzw. 150 mg/L bis 450 mg/L (Chlor) [Wal1]. Das Ziel dieser Arbeit liegt in der Erfassung von Konzentrationen < 1 mg/L.

2 Material und Methoden

2.1 Datengrundlage

Die Grundlage bilden ca. 300 UV/VIS-Spektren, die mit dem Absorptionsspektrometer Spectro::lyser der Firma s::can im Wellenlängenbereich zwischen 200 nm und 750 nm ($\Delta\lambda = 2,5$ nm) und einer optischen Weglänge von 10 cm aufgenommen wurden.

Der Datensatz umfasst einerseits Kalibriermessreihen von sowohl Chlor und Chlordioxid als auch Mischungen von Chlor und Chlordioxid. Diese wurden bei definierten pH-Werten in Pufferlösungen (7,5 bis 9,5) bzw. synthetischen Modellwässern aufgenommen, die eine vernachlässigbare Eigenabsorption aufweisen. Darüber hinaus wurden auch zahlreiche Versuche durchgeführt, bei denen Realwasserproben mit unterschiedlichen Chlor-/Chlordioxidmengen versetzt wurden und deren Restgehalte nach einer Reaktionszeit von 30 min bestimmt wurden. Eine Übersicht dazu gibt Tab. 1.

Tab. 1: Datengrundlage (Anzahl Spektren) für die Modelle von Chlordioxid und Chlor.

Dataset	Chlordioxid	Freies Chlor
Kalibration Cl ₂	78	78
Kalibration Cl ₂ /ClO ₂	7	11
Kalibration ClO ₂	59	60
Monochloramin	65	3
Realwasser + Cl ₂	58	58
Realwasser + Cl ₂ /ClO ₂	5	5
Realwasser + ClO ₂	21	21
Sonstige	12	3
Summe	305	239

Wie aus Tab. 1 ersichtlich, wurde für jede Verbindung (Chlor, Chlordioxid) ein separates Modell erstellt. Der Datensatz Monochloramin beinhaltet Spektren von monochloraminhaltigen synthetischen Lösungen. Monochloramin entsteht als Nebenprodukt bei der Desinfektion von ammoniumhaltigen Wässern. Der Datensatz Sonstige beinhaltet verschiedene Blindwerte von desinfektionsmittelfreien Pufferlösungen.

Als Referenzverfahren zur Bestimmung von Chlor sowie Chlordioxid diente das DPD-Verfahren.

2.2 Modellierung

Bei der Bestimmung der Chlor-/Chlordioxidkonzentration handelt es sich um ein Regressionsproblem, zur dessen Lösung im Wesentlichen eine Dimensionsreduktion in Kombination mit einem Regressor (Lineare Regression bzw. neuronales Netz) benutzt wurden. Die Dimensionsreduktion erfolgte durch eine Hauptkomponentenanalyse (engl. Principal Components Analysis, PCA). Es handelt sich dabei um ein bewährtes Verfahren zur Entrauschung und Dekorrelation von Daten, bei dem vereinfacht ausgedrückt korrelierende Features zu Hauptkomponenten zusammengefasst werden und somit die Anzahl der Eingangsgrößen reduziert wird. Die Dimensionsreduktion und Dekorrelation sind bei dem vorliegenden Problem zwingende Voraussetzungen für die Anwendung einer linearen Regression, da

- Absorptionsspektren eine hohe Korrelation zwischen den einzelnen Wellenlängen (Features) aufweisen, so dass eine Multikollinearität vorliegt und
- die Anzahl der Features (256 Werte pro Spektrum) in derselben Größenordnung wie die Anzahl der Spektren liegt, so dass ein unterbestimmtes Gleichungssystem im Fall von Chlordioxid vorliegt.

Für beide Desinfektionsmittel wurde je ein mehrstufiges Modell (Pipeline) erstellt, dargestellt in Abb. 3.

Der erste Schritt besteht in der Berechnung der Ableitung der Spektren. Diese erfolgt durch einen Savitzky-Golay Filter (gleitendes Polynom) und zwar unabhängig für jedes Spektrum. Durch die Bildung der Ableitung können Basislinienveränderungen im Spektrum korrigiert werden und zudem spektrale Eigenschaften besser hervorgehoben werden. Anschließend wird für die weiteren Berechnungen nur der Wellenlängenbereich zwischen 240 nm und 450 nm betrachtet, da Chlor und Chlordioxid nur hier eine Absorption aufweisen. Im nächsten Schritt erfolgt eine Mittenzentrierung mit dem Median und die Skalierung mit dem Interquartilabstand (Robust Scaling) für jedes Feature (Wellenlänge). Mit Hilfe einer Hauptkomponentenanalyse erfolgt nun eine Dimensionsreduktion auf k Komponenten. Im Fall von Chlordioxid erfolgt abschließend eine einfache multiple lineare Regression. Im Fall von Chlor erfolgt erneut eine robuste Skalierung für den mittels PCA auf k Features transformierten Datensatz (Scores), um sicherzustellen, dass alle k Features mit gleicher Wichtung als Eingangsdaten in ein neuronales Netz (Multilayer Perceptron, MLP-Regressor) eingehen. Bei neuronalen Netzen handelt es sich um eine Klasse von Algorithmen, die aufgrund ihrer flexiblen Konfigurierbarkeit (Architektur) sehr leistungsstark sind und auch nichtlineare Probleme sehr gut approximieren können.

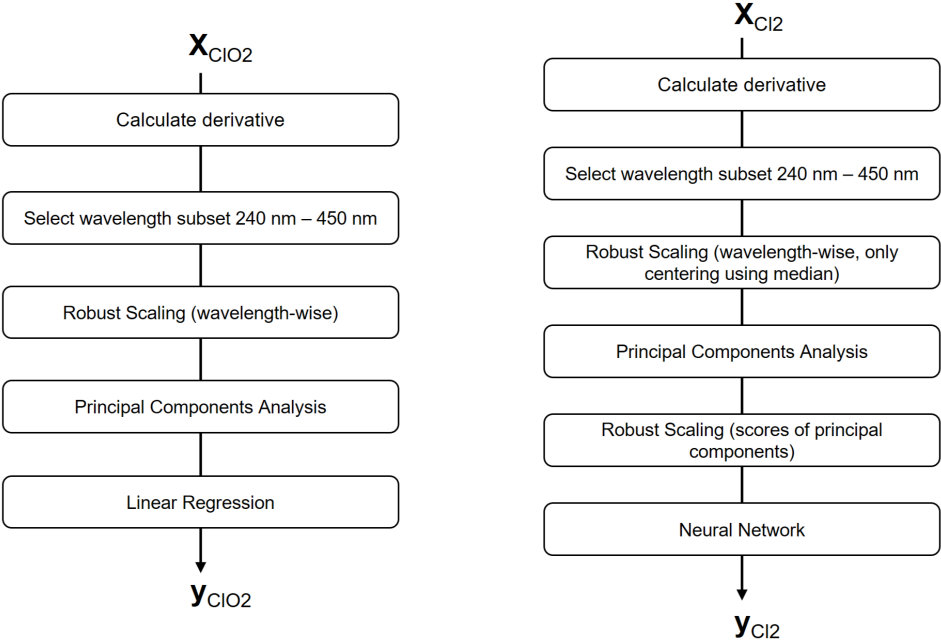


Abb. 3: Pipelines für Chlordioxid (links) und Chlor (rechts).

Für beide Modelle wurde ein Hyperparametertuning durchgeführt, mit den in Tab. 2 und Tab. 3 dargestellten Parametern.

Tab. 2: Hyperparametertuning Chlordioxid.

Schritt	Parameter	Werte	Bester Wert
Derivative	Window size	15, 25, 35	35
Derivative	Order	0, 1, 2	1
PCA	Number of components	5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12	12

Tab. 3: Hyperparametertuning Chlor.

Schritt	Parameter	Werte	Bester Wert
Derivative	Window size	25, 35	35
Derivative	Order	0, 1, 2	2
PCA	Number of components	5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12	12
Neural Network	Number of units of hidden layer	1-layer: 2, 5, 10	10

Unveränderliche Parameter des MLP-Regressor, die nicht im Hyperparameter Tuning verändert wurden, sind in Tab. 4 aufgeführt.

Tab. 4: Hyperparameter des MLP-Regressors.

Parameter	Wert
Aktivierungsfunktion Hidden Layer	tanh
Aktivierungsfunktion Output Layer	softplus
Solver	Stochastic Gradient Descent
Learning Rate	1e-3
Regularization	0
Momentum	0
Weights Initialization	Xavier

Das Training der Modelle erfolgte mittels einer 5fachen Kreuzvalidierung, wobei 20 % der Spektren als unabhängiger Testdatensatz verwendet wurden und 80 % der Spektren für 5-fache Kalibrierung/Validierung. Die Zuordnung erfolgte dabei durch eine geschichtete Zufallsstichprobe wobei als Schichtung zwei Konzentrationsklassen (Desinfektionsmittelgehalt $\leq 0,1$ mg/L, Desinfektionsmittelgehalt $> 0,1$ mg/L) verwendet wurde. Als Metrik wurde der Root Mean Squared Error (RMSE) verwendet und auf Basis der Kreuzvalidierung insgesamt drei Maße abgeleitet:

- RMSEC (Calibration),
- RMSEV (Validation),
- RMSEP (Prediction).

2.3 Praxisanwendung in Indien

Zum Nachweis der Anwendbarkeit wurde das Verfahren der spektroskopischen Chlorbestimmung im Rahmen eines BMBF-Projektes in Indien angewandt (Stadt Haridwar am Ganges in Nordindien). Hierzu wurde eine Anlage, die Chlor für die Desinfektion von Uferfiltrat erzeugt, mit einem online-Spektrometer ausgerüstet und die Chlorkonzentration im Trinkwasser unmittelbar nach der Desinfektion gemessen. Der Förderbrunnen wurde aufgrund von Wasserknappheit nur zweimal täglich für jeweils vier Stunden betrieben. Die Spektren wurden in einem Intervall von 15 Minuten aufgenommen. Mindestens einmal die Woche wurde zudem die Chlorkonzentration photometrisch mit einem vor-Ort-Messgerät mittels DPD bestimmt.

Im Rahmen der Praxisanwendung erfolgte zudem eine sogenannte vor-Ort-Kalibrierung. Hier wird ein Modell für ein spezifisches Wasser, in diesem Fall das Uferfiltrat des Ganges, erstellt. Dabei werden ausschließlich Wasserproben des Ganges für das Modelltraining verwendet. Weitere Trainingssamples können erzeugt werden, indem die Wasserproben zusätzlich mit verschiedenen Chlormengen versetzt werden, um den Umfang des Datensatzes zu erhöhen. Der Vorteil ist eine höhere Genauigkeit, jedoch ist eine Übertragbarkeit auf andere Standorte nicht gewährleistet.

3 Ergebnisse und Diskussion

3.1 Modellentwicklung

Die Ergebnisse des Chlordioxidmodells sind in Abb. 4 dargestellt, in der die wahren (gemessenen) Konzentrationen und die auf Basis des Modells berechneten Konzentrationen aufgetragen sind.

Bereits mit einer PCR-Regression wird eine zufriedenstellende Modellgüte erzielt. Die RMSE-Werte (für Calibration, Validation und Prediction) liegen zwischen 0,026 mg/L und 0,037 mg/L, was zufriedenstellend ist. Die Dosierung von Chlordioxid erfolgt in der Praxis mit weitaus höheren Konzentrationen (bis 0,4 mg/L). Erfolgt daher die Überwachung der Chlordioxidkonzentration unmittelbar nach der Dosierung, so besitzt das Modell eine ausreichende Güte. Nur bei der Überwachung der Restkonzentration im Verteilungsnetz muss die Empfindlichkeit des Modells erhöht werden, um auch Restkonzentrationen von 0,05 mg/L sicher nachweisen zu können. Die Ursache für die geringen Restkonzentrationen im Netz ist die Zehrung bzw. Reaktion mit anderen Wasserinhaltsstoffen.

Für die Bestimmung von Chlor wurden zwei Modelle erstellt, deren Güte in Abb. 5 dargestellt ist.

Die PCR-Regression als Benchmark weist eine ungenügende Güte auf. Ursache ist die starke Abhängigkeit des Chlors vom pH-Wert. Die untersuchten Wässer weisen einen pH-Wert

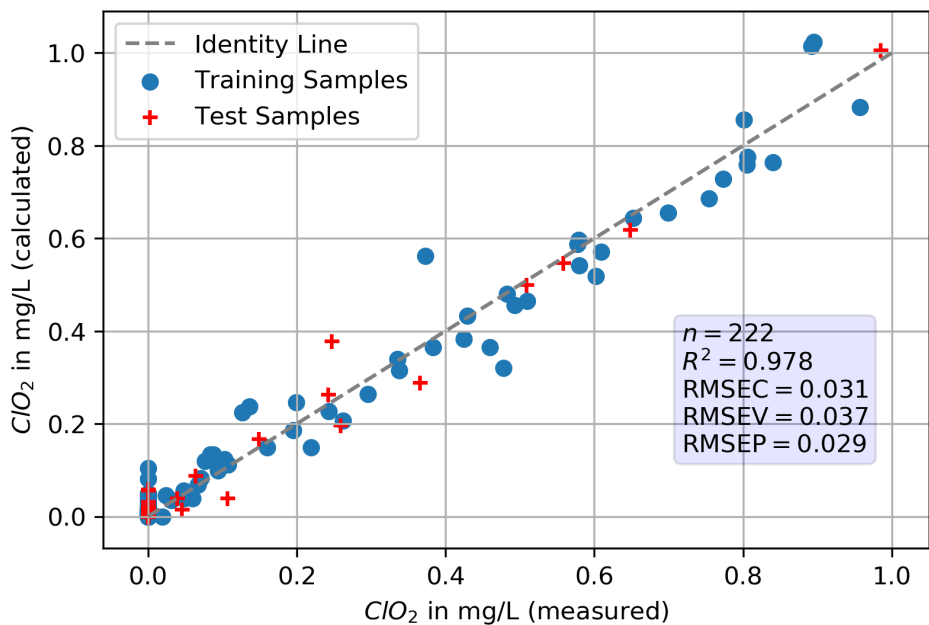


Abb. 4: Modellgüte des PCR-Modells für Chlordioxid.

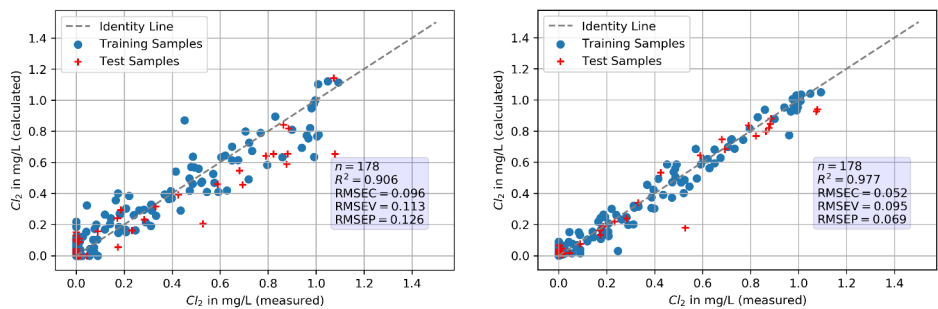


Abb. 5: Modellgüte des Benchmark (PCR-Regression) sowie der PCA-MLPR (rechts) für die Bestimmung von freiem Chlor.

zwischen 7,5 und 9,5 auf (siehe Abb. 6). In diesem Bereich liegt Chlor in den Spezies hypochlorige Säure (HOCl) und Hypochlorit (OCl^-) vor. Beide Spezies absorbieren jedoch UV-Licht unterschiedlich stark. Als Maß für die Absorption wird der Extinktionskoeffizient ϵ (Einheit $\text{L mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$) verwendet; je höher ϵ , desto stärker ist das Absorptionssignal. Hierbei zeigt vor allem Hypochlorit eine starke Absorption mit einem ϵ von ca. $350 \text{ L mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$, während die hypochlorige Säure mit einem ϵ von $100 \text{ L mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$ einen wesentlich geringeren Extinktionskoeffizienten aufweist [Ki19].

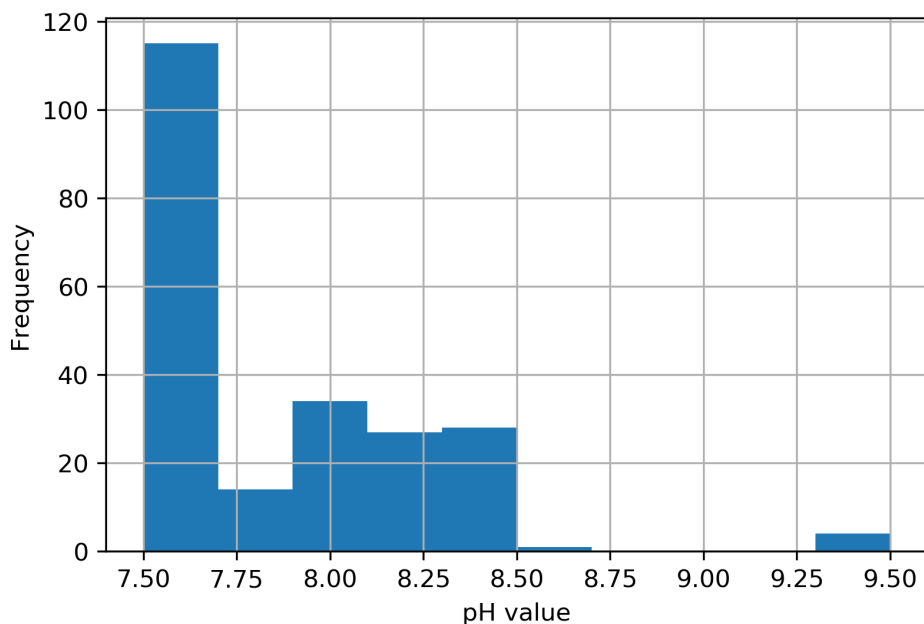


Abb. 6: Histogramm des pH-Wertes der analysierten Wasserproben ($n = 223$).

Die Modellgüte der PCA-MLPR ist dagegen wesentlich besser als die des PCR-Benchmark. Offenbar besteht zwischen den Scores der PCA und der Chlorkonzentration eine nichtlineare Beziehung, die durch den MLP-Regressor besser dargestellt werden kann als durch eine lineare Regression.

Aus der Modellgüte lassen sich Nachweis- und Bestimmungsgrenzen berechnen [RE11], die in der Analytik wichtige Parameter für die quantitative Bestimmung von Wasserqualitätsparametern darstellen. Die Nachweisgrenze gibt an, ob eine Messgröße (Chlor, Chlordioxid) gerade noch zuverlässig bestimmt werden kann (ja/nein-Entscheidung). Die Bestimmungsgrenze ist diejenige Konzentration, ab der eine Konzentration für die Messgröße angegeben werden kann. Die erzielten Nachweis- und Bestimmungsgrenzen für Chlor und Chlordioxid sind in Tab. 5 zusammengefasst.

Tab. 5: Nachweis- und Bestimmungsgrenzen des Chlor- und Chlordioxidmodells.

Messgröße	Nachweisgrenze in mg/L	Bestimmungsgrenze in mg/L
Chlor (PCA-MLPR)	0,084	0,302
Chlordioxid (PCR)	0,054	0,196

3.2 Praxisanwendung

Für eine Anwendung des Verfahrens in Deutschland wäre mindestens eine Bestimmungsgrenze von 0,1 mg/L für Chlor bzw. 0,05 mg/L für Chlordioxid wünschenswert. Dies ist mit 0,3 mg/L bzw. 0,2 mg/L noch nicht gegeben. Es ist jedoch davon auszugehen, dass mit einer lokalen Kalibrierung weitaus geringe Bestimmungsgrenzen erzielt werden können. Die in dieser Arbeit gezeigten Modelle basieren auf einer Vielzahl verschiedener Wasserproben unterschiedlicher Herkunft (Oberflächenwasser, Grundwasser). Bei einer lokalen Kalibrierung wird dagegen ein Modell für ein spezifisches Wasser, also beispielsweise für ein konkretes Wasserwerk erstellt. Nach diesem Prinzip wurde das Verfahren an einem Wasserwerk in Indien eingesetzt. Im Rahmen eines BMBF-Vorhabens wurde dort eine Anlage zur Desinfektion von Uferfiltrat mit Chlor installiert und mit einer online-Spektrometersonde zur Überwachung der Chlorkonzentration ausgestattet. Dabei konnte das in dieser Arbeit vorgestellte Verfahren zum Nachweis von Chlor mittels optischer Spektroskopie im realen Praxisbetrieb angewendet werden. Hierzu wurde das Spektrometer über USB an einem Laptop angeschlossen, so dass Datenübertragung und –auswertung in Echtzeit erfolgte. Für die grafische Darstellung wurde ein Dashboard basierend auf der Pythonbibliothek *bokeh* entwickelt. Somit konnte die aktuelle Chlorkonzentration während des Betriebes jederzeit vom Anlagenbetreiber abgelesen werden. Die Ergebnisse sind in Abb. 7 am Beispiel eines Tages (09.02.2018) dargestellt.

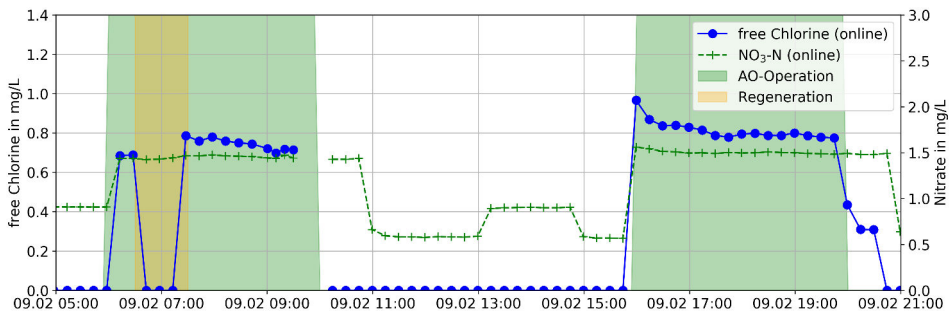


Abb. 7: Bestimmung von Chlor mittels optischer Spektroskopie im realen Praxisbetrieb an einer Anlage in Indien.

Die Anlage (AO) war aufgrund von Wassermangel nur zweimal täglich für jeweils vier Stunden im Betrieb (grün dargestellt). Mit Hilfe der online-Spektrometersonde wurde sowohl freies Chlor als auch Nitrat ermittelt. Die Anlage wurde zusammen mit der Spektrometersonde über einen Zeitraum von drei Monaten betrieben. In dieser Zeit erfolgten

Vergleichsmessungen (Bestimmung der Chlorkonzentration mit dem Referenzverfahren DPD). Der erzielte RMSEP beträgt 0,051 mg/L (siehe Abb. 8) und ist damit niedriger als der RMSEP des in Abb. 5 dargestellten Modells. Dies zeigt, dass mittels einer lokalen Kalibrierung eine höhere Modellgüte erzielt werden kann. Dies liegt unter anderem daran, dass der pH-Wert des Wassers nahezu konstant 7,5 betrug.

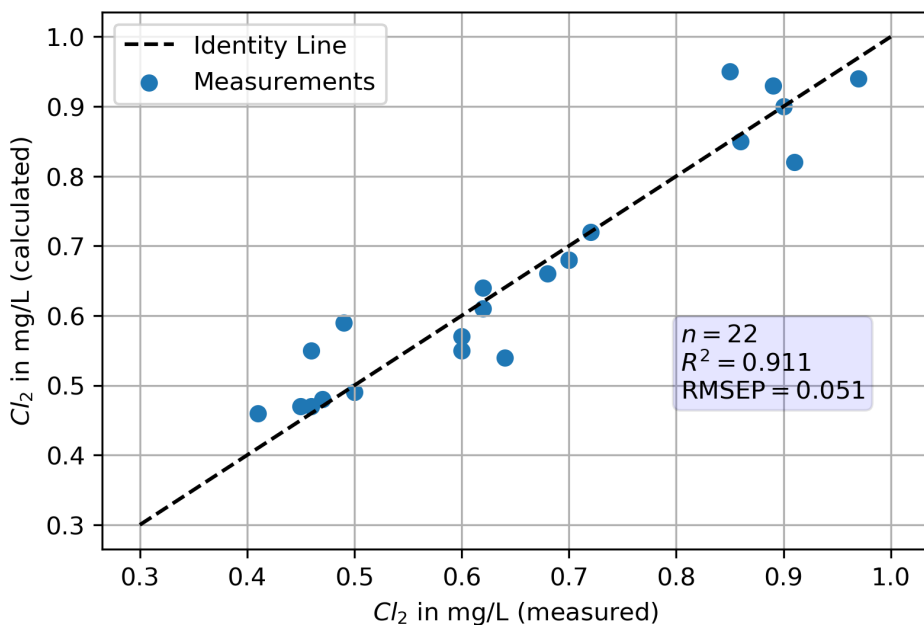


Abb. 8: Güte der Chlorbestimmung unter Praxisbedingungen in Indien.

4 Zusammenfassung und Ausblick

In der Arbeit wurde eine Methode gezeigt, wie mit Hilfe von maschinellem Lernen eine quantitative Spektrenanalyse zur Bestimmung von Chlor als auch Chlordioxid auf Basis von UV/VIS-Absorptionsspektren erzielt werden kann. Dabei wurden Nachweis- und Bestimmungsgrenzen von 0,08 mg/L und 0,30 mg/L für Chlor sowie 0,05 mg/L und 0,20 mg/L erreicht.

Eine grundsätzliche Herausforderung bei der Modellierung besteht darin, dass die Absorption von Chlor und Chlordioxid im Konzentrationsbereich von kleiner einem mg/L im Vergleich zur Absorption anderer Wasserinhaltsstoffe (natürliche organische Kohlenstoffverbindungen, DOC) sehr gering ist. Darüber hinaus zeigt Chlor eine ausgeprägte pH-Wert-Abhängigkeit, was eine exakte Quantifizierung zusätzlich erschwert. Dennoch

konnte mit einer Hauptkomponentenanalyse und einem neuronalen Netz (Multilayer Perceptron) eine zufriedenstellende Modellgüte erzielt werden. Die Anwendbarkeit der Methode wurde im Realbetrieb an einer Desinfektionsanlage in Haridwar, Nordindien, nachgewiesen.

Der Vorteil der spektroskopischen Bestimmung von Desinfektionsmittelrestgehalten (Chlor, Chlordioxid) besteht darin, dass die Methode einfach zu benutzen und zudem wartungsarm ist. Darüber hinaus können mit einem online-Spektrometer auch weitere wichtige Wasserqualitätsparameter wie der DOC, die Färbung, Trübung und der Nitratgehalt bestimmt werden.

Bereits jetzt besitzt die Methode damit vor allem in Entwicklungsländern ein hohes Potential, da dort nur unzureichendes Personal und eingeschränkte Laborkapazitäten für die Überwachung von Wasseraufbereitungsprozessen zur Verfügung stehen.

Dennoch besteht Verbesserungspotential, indem mehr Daten sowie der pH-Wert des Wassers als zusätzliche Eingangsgröße verwendet wird. Damit ist die Methode perspektivisch auch für Deutschland geeignet, wenn entweder höhere Restkonzentrationen im Wasser vorliegen oder die Empfindlichkeit gesteigert wird.

5 Danksagung

Diese Arbeit wurde vom deutschen Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) im Rahmen der Projekte „*Sichere und nachhaltige Trinkwassergewinnung in Indien durch Kopplung von naturnahen und innovativen Verfahren* (NIRWINDU, (Förderkennzeichen 02WCL1356B) sowie *Wissenschaftlich begründeter Masterplan Uferfiltration zur Trinkwasserversorgung in Vietnam* (AquaViet, Förderkennzeichen 02WCL1472C) unterstützt.

Literaturverzeichnis

- [Ke06] Kessler, Waltraud: Multivariate Datenanalyse für die Pharma-, Bio- und Prozessanalytik. Wiley-VCH, 2006.
- [Ki19] Kishimoto, Naoyuki: State of the Art of UV/Chlorine Advanced Oxidation Processes: Their Mechanism, Byproducts Formation, Process Variation, and Applications. *Journal of Water and Environment Technology*, 17(5):302–335, 2019.
- [RE11] Reichenbächer, Manfred; Einax, Jürgen W.: *Challenges in Analytical Quality Assurance*. Springer, 2011.
- [Wa11] Wang, Qiang; Chen, Kefu; Li, Jun; Xu, Jun; Liu, Shanshan: Simultaneous determination of chlorine dioxide and hypochlorous acid in bleaching systems. *BioResources*, 6(2):1868–1879, 2011.