Institut für Radioökologie und Strahlenschutz
Leibniz Universität Hannover

Theorie der Messunsicherheiten und charakteristischen Grenzen

Rolf Michel

FTU, Karlsruhe, 18. März 2014

Institut für Radioökologie und Strahlenschutz
Leibniz Universität Hannover

Inhalt

- Stand der Normung
- Einige Grundlagen der Metrologie
- All unser Wissen: PDFs!
- Einige Anmerkungen zur Wahrscheinlichkeit
- Eine Bayes'sche Theorie der Messunsicherheiten
- ISO GUM und GUM Supplement I
- Messunsicherheiten nach dem GUM
- Charakteristische Grenzen nach ISO 11929
- Einige einfache Beispiele

Institut für Radioökologie und Strahlenschutz
Leibniz Universität Hannover

Inhalt

- Stand der Normung
- Einige Grundlagen der Metrologie
- All unser Wissen: PDFs!
- Einige Anmerkungen zur Wahrscheinlichkeit
- Eine Bayes'sche Theorie der Messunsicherheiten
- ISO GUM und GUM Supplement I
- Messunsicherheiten nach dem GUM
- Charakteristische Grenzen nach ISO 11929
- Einige einfache Beispiele

Normung von Messunsicherheiten

DIN 1319 Teil 3	Auswertung von Messungen einer einzelnen Messgröße, Messunsicherheit	1996
DIN 1319 Teil 4	Behandlung von Unsicherheiten bei der Auswertung von Messungen	1999
ISO	Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen, Beuth Verlag, Berlin, Köln	1993
ISO	ISO Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement, corrected reprint, ISO, Genf	(1993) 1995
EURACHEM	EURACHEM Working Group on Uncertainty in Chemical Measurement, Quantifying Uncertainty in Chemical Measurement	1995
DIN V ENV 13005	Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen	1999
IAEA Tecdoc 1401	Quantifying uncertainty in nuclear analytical measurements	2004
DIN VDE 0493	DIN VDE 0493 Beiblatt 2: Strahlenschutzinstrumentierung – Bestimmung der Unsicherheit beim Messen	2007
JCGM	International vocabulary of metrology - Basic and general concepts and associated terms (VIM)	2008
JCGM	Evaluation of measurement data - Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM)	2008
JCGM	Evaluation of measurement data - An Introduction to the „Guide to the expression of uncertainty in measurement“ and related documents	2008
JCGM	Evaluation of measurement data - Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM) - Supplement 1 to the „Guide to the expression of uncertainty in measurement“ - Propagation of distributions using a Monte Carlo method	2009
JCGM	Evaluation of measurement data – Supplement 2 to the "Guide to the expression of uncertainty in measurement" - Extension to any number of output quantities	2011

VIM

JCGM
Joint Committee for Guides in Metrology (BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP and OIML)

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

GUM

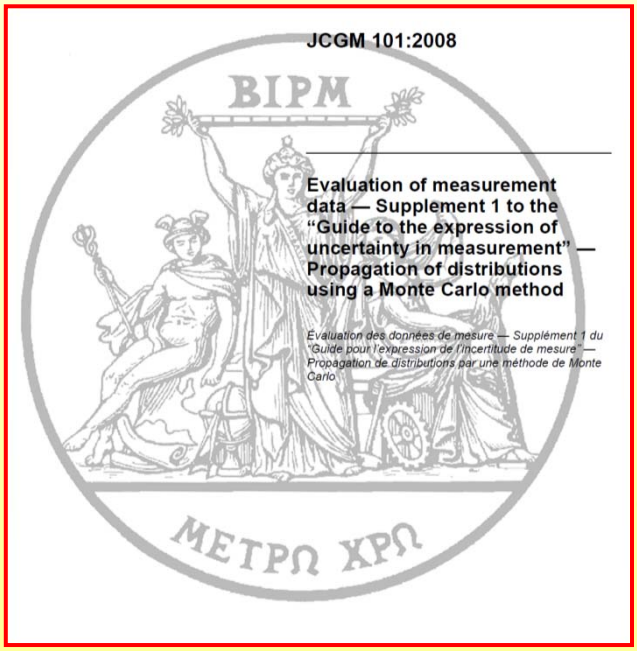
JCGM
Joint Committee for Guides in Metrology (BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP and OIML)

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

An introduction to the GUM

JCGM
Joint Committee for Guides in Metrology (BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP and OIML)

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover



GUM Supplement I

JCGM
Joint Committee for Guides in Metrology (BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP and OIML)

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

GUM Supplement II

JCGM
Joint Committee for Guides in Metrology (BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP and OIML)

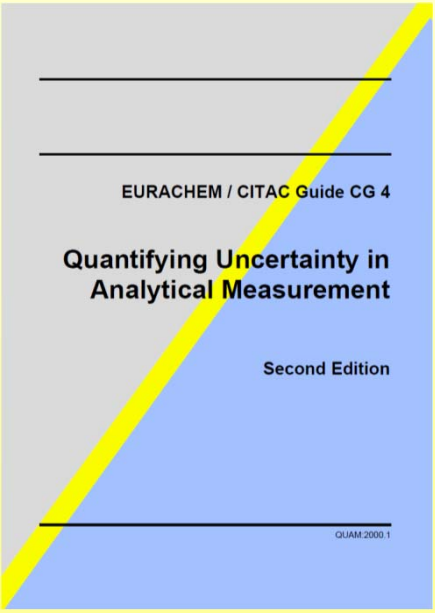
VIM, GUM, …

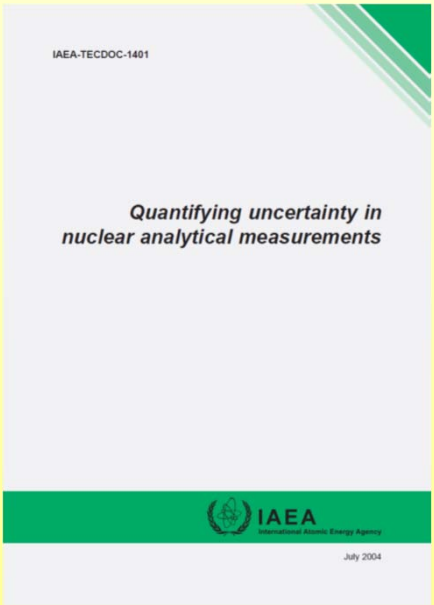
Kostenlos herunterladen unter:

http://www.bipm.org/en/publications/guides/gum.html

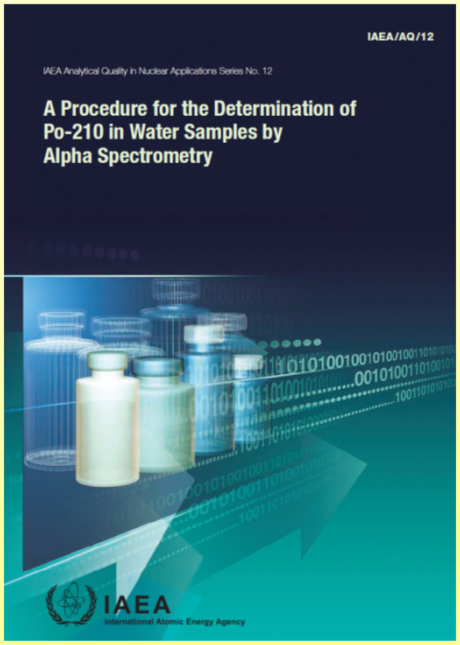
Folgenden Dokumente werden derzeit vom JCGM vorbereitet:

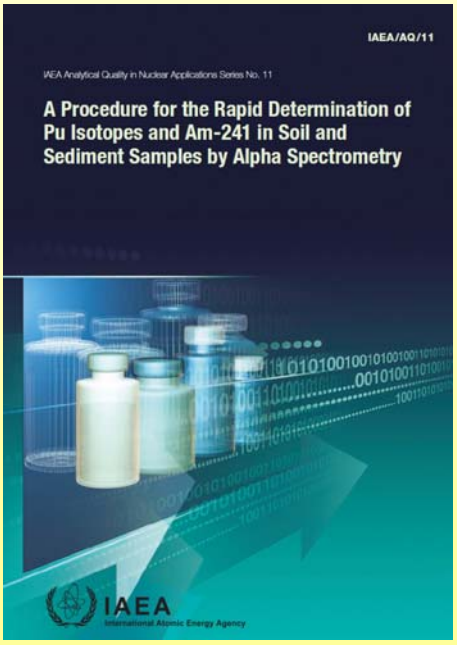
- **Evaluation of measurement data – Supplement 3 to the "Guide to the expression of uncertainty in measurement" – Modelling**
- **Evaluation of measurement data – Applications of the least-squares method**





R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover





R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

INTERNATIONAL STANDARD

ISO 11929

First edition
2010-03-01

… schon nicht mehr so ganz neu!

Determination of the characteristic limits (decision threshold, detection limit and limits of the confidence interval) for measurements of ionizing radiation — Fundamentals and application

Détermination des limites caractéristiques (seuil de décision, limite de détection et extrémités de l'intervalle de confiance) pour mesurages de rayonnements ionisants — Principes fondamentaux et applications

Reference number
ISO 11929:2010(E)

© ISO 2010

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Bestimmung der charakteristischen Grenzen (Erkennungsgrenze, Nachweisgrenze und Grenzen des Vertrauensbereichs) bei Messungen ionisierender Strahlung – Grundlagen und Anwendungen (ISO 11929:2010)

Determination of the characteristic limits (decision threshold, detection limit and limits of the confidence interval) for measurements of ionizing radiation – Fundamentals and application
(ISO 11929:2010)

Détermination des limites caractéristiques (seuil de décision, limite de détection et extrémités de l'intervalle de confiance) pour mesurages de rayonnements ionisants – Principes fondamentaux et applications
(ISO 11929:2010)

Ersatzvermerk
Ersatz für DIN 25482-1:1989-04,
DIN 25482-1 Beiblatt 1:1992-03,
DIN 25482-2:1992-09,
DIN 25482-2 Beiblatt 1:2000-09,
DIN 25482-3:1993-02,
DIN 25482-4:1995-12,
DIN 25482-5:1993-06,
DIN 25482-5 Beiblatt 1:1997-12,
DIN 25482-6:1993-02,
DIN 25482-6 Beiblatt 1:1998-12,
DIN 25482-7:1997-12,
DIN 25482-10:2000-05,
DIN 25482-11:2003-02,
DIN 25482-12:2003-02 und
DIN 25482-13:2003-02

DIN ISO 11929: 2011-01

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Normen zur Messung der Umweltradioaktivität mit expliziter Anwendung von ISO 11929

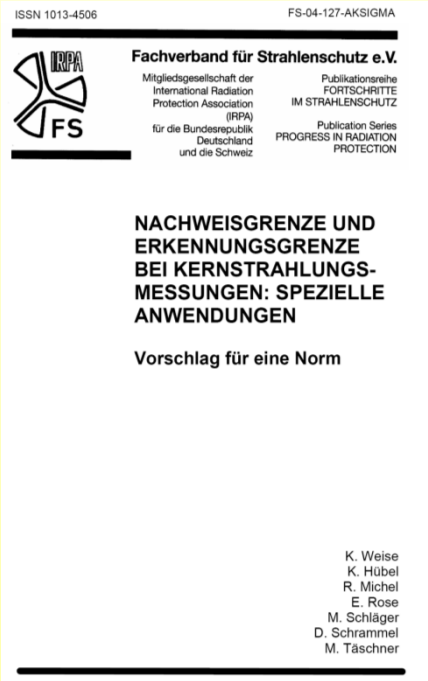
ISO/TC85/SC2/WG17 "Radioactivity measurements"

- ISO 7503 Measurement and evaluation of radioactive surface contamination
- ISO 11665 Measurement of Radon 222 in the environment – Parts 1 to 7
- ISO 18589 Measurement of Radioactivity in the environment – Soil – parts 1 to 7
- NWIP on Radon-220 (Thoron) measurement

ISO/TC 147 „Water Quality“

- ISO 9698: Water quality – Determination of tritium activity concentration – Liquid scintillation counting method
- ISO 10704 Water quality – Measurement of gross alpha and gross beta activity in non-saline water – Thin source deposit method
- ISO 13162 Water quality — Determination of carbon 14 activity — Liquid scintillation counting method
- ISO 13164 Water quality – Measurement of the activity concentration of radon-222 and its short-lived decay products

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover


ISSN 1013-4506 FS-04-127-AKSIGMA

Fachverband für Strahlenschutz e.V.

Mitgliedsgesellschaft der International Radiation Protection Association (IRPA) für die Bundesrepublik Deutschland und die Schweiz

Publikationsreihe FORTSCHRITTE IM STRAHLENSCHUTZ

Publication Series PROGRESS IN RADIATION PROTECTION

NACHWEISGRENZE UND ERKENNUNGSGRENZE BEI KERNSTRAHLUNGS-MESSUNGEN: SPEZIELLE ANWENDUNGEN

Vorschlag für eine Norm

K. Weise
K. Hübel
R. Michel
E. Rose
M. Schläger
D. Schrammel
M. Täschner

Charakteristische Grenzen *nach* DIN 25482-10

ISSN 1013-4506
ISBN 3-8249-0904-9
© by TÜV-Verlag GmbH, Köln
TÜV Rheinland Group, Köln 2004

www.irs.uni-hannover.de

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

ISSN 1013-4506 FS-05-129-AKSIGMA

Fachverband für Strahlenschutz e.V.

Mitgliedsgesellschaft der International Radiation Protection Association (IRPA) für die Bundesrepublik Deutschland und die Schweiz

Publikationsreihe FORTSCHRITTE IM STRAHLENSCHUTZ

Publication Series PROGRESS IN RADIATION PROTECTION

DETERMINATION OF THE DETECTION LIMIT AND DECISION THRESHOLD FOR IONIZING-RADIATION MEASUREMENTS: FUNDAMENTALS AND PARTICULAR APPLICATIONS

Proposal for a standard

K. Weise
K. Hübel
R. Michel
E. Rose
M. Schläger
D. Schrammel
M. Täschner

Characteristic Limits *after* ISO 11929-7 and DIN 25482-10

ISSN 1013-4506
ISBN 3-8249-0945-6
© by TÜV-Verlag GmbH, Köln
TÜV Rheinland Group, Köln 2004
Gesamtherstellung: TÜV-Verlag GmbH, Köln
Printed in Germany 2005

www.irs.uni-hannover.de

Die Grundlagen und eine Übersicht

Radiation Protection Dosimetry Advance Access published July 25, 2006

Radiation Protection Dosimetry (2006), 1 of 12
doi:10.1093/rpd/ncl095

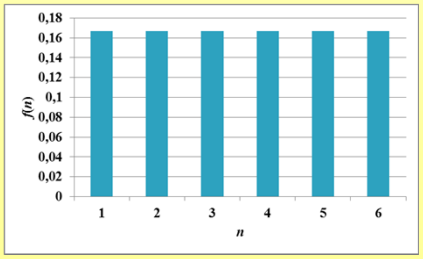
BAYESIAN DECISION THRESHOLD, DETECTION LIMIT AND CONFIDENCE LIMITS IN IONISING-RADIATION MEASUREMENT

K. Weise[1], K. Hübel[2], E. Rose[3], M. Schläger[4], D. Schrammel[5], M. Täschner[6] and R. Michel[6,*]
[1]Parkstrasse 11, D-38179 Schwülper, Germany
[2]Bayerisches Landesamt für Umwelt, Bürgermeister-Ulrich-Strasse 160, D-86179 Augsburg, Germany
[3]Gutenbergstrasse 22, D-52428 Jülich, Germany
[4]Forschungszentrum Jülich, S-BP, D-52425 Jülich, Germany
[5]Forschungszentrum Karlsruhe, Fortbildungszentrum für Technik und Umwelt (FTU), D-76021 Karlsruhe, Germany
[6]Zentrum für Strahlenschutz und Radioökologie, Universität Hannover, Am Kleinen Felde 30, D-30167 Hannover, Germany

Was ist Unsicherheit?

…, dass ich nicht weiß, wie der Würfel fallen wird.

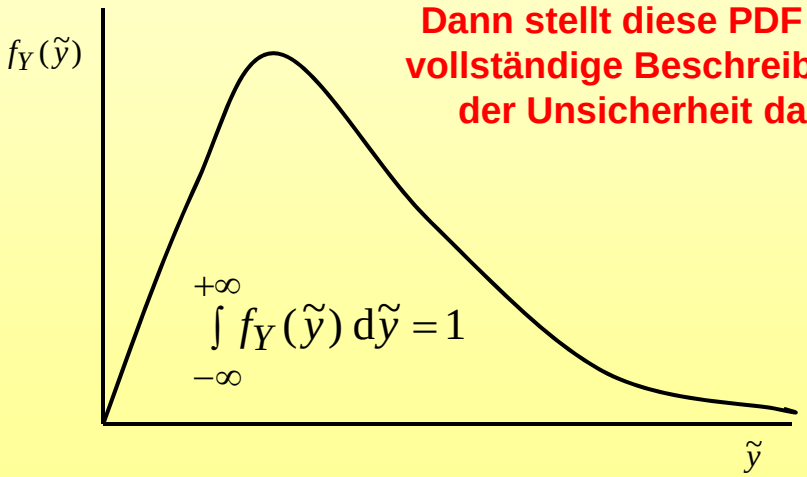
Ich kann nur eine Wahrscheinlichkeit angeben.



Die vollständige Beschreibung der Unsicherheit: eine PDF.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Sei $f_Y(\tilde{y})$ die PDF einer Zufallsvariable, die als Schätzer von Y dient

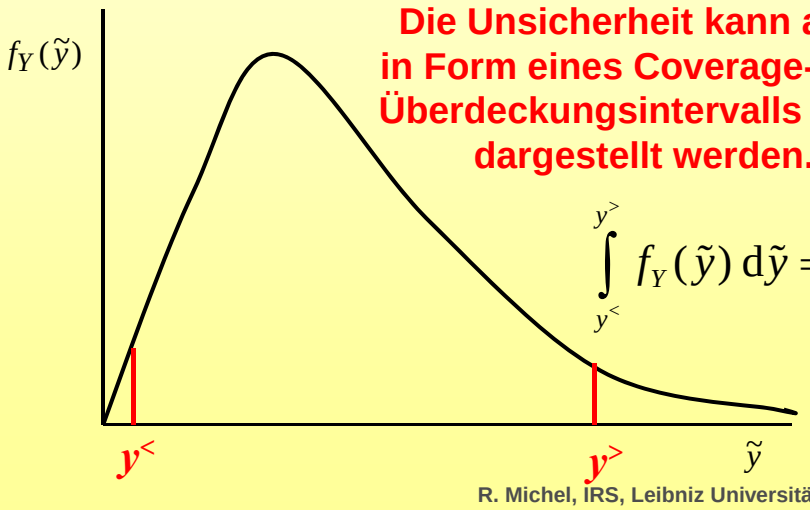


$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_Y(\tilde{y})\,\mathrm{d}\tilde{y} = 1$$

Dann stellt diese PDF die vollständige Beschreibung der Unsicherheit dar.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Sei $f_Y(\tilde{y})$ die PDF einer Zufallsvariable, die als Schätzer von Y dient



Die Unsicherheit kann auch in Form eines Coverage- oder Überdeckungsintervalls $[y^<, y^>]$ dargestellt werden.

$$\int_{y^<}^{y^>} f_Y(\tilde{y})\,\mathrm{d}\tilde{y} = 1-\gamma$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

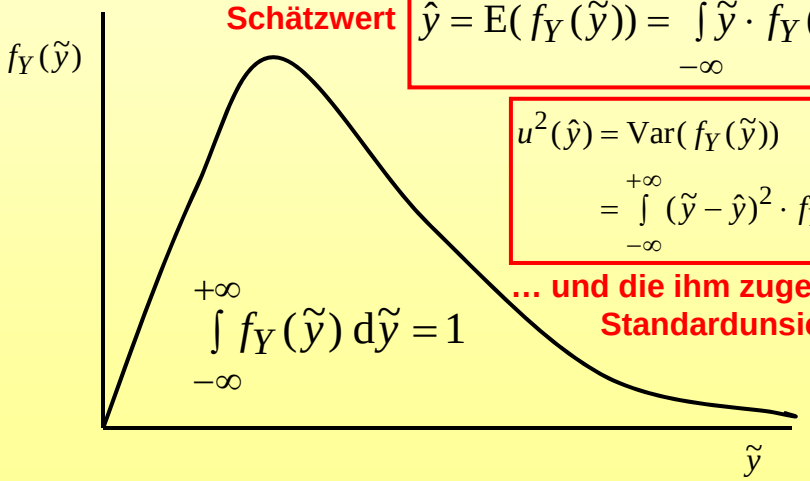
Sei $f_Y(\tilde{y})$ die PDF einer Zufallsvariable, die als Schätzer von Y dient

Der beste Schätzwert

$$\hat{y} = \mathrm{E}(f_Y(\tilde{y})) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{y} \cdot f_Y(\tilde{y})\,\mathrm{d}\tilde{y}$$

$$u^2(\hat{y}) = \mathrm{Var}(f_Y(\tilde{y})) = \int_{-\infty}^{+\infty} (\tilde{y}-\hat{y})^2 \cdot f_Y(\tilde{y})\,\mathrm{d}\tilde{y}$$

... und die ihm zugeordnete Standardunsicherheit



$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_Y(\tilde{y})\,\mathrm{d}\tilde{y} = 1$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Messunsicherheit, Unsicherheit, Standardunsicherheit

Parameter zur Charakterisierung der Dispersion der (wahren) Werte einer Messgröße, die aufgrund der vorhandenen Information der Messgröße zugeordnet werden kann:

$$u(y)$$

International vocabulary of basic and general terms in metrology (VIM) — Third edition, ISO/IEC 2007.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Institut für Radioökologie und Strahlenschutz
Leibniz Universität Hannover

Inhalt

- Stand der Normung
- **Einige Grundlagen der Metrologie**
- All unser Wissen: PDFs!
- Einige Anmerkungen zur Wahrscheinlichkeit
- Eine Bayes'sche Theorie der Messunsicherheiten
- ISO GUM und GUM Supplement I
- Messunsicherheiten nach dem GUM
- Charakteristische Grenzen nach ISO 11929
- Einige einfache Beispiele

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Einige Grundlagen der Metrologie

Seien X_i Größen, deren wahren Werte $\tilde{x}_i$ unsicher sind.

Das Modell der Auswertung ist gegeben durch:

$$Y = G(X_1, \ldots, X_n)$$

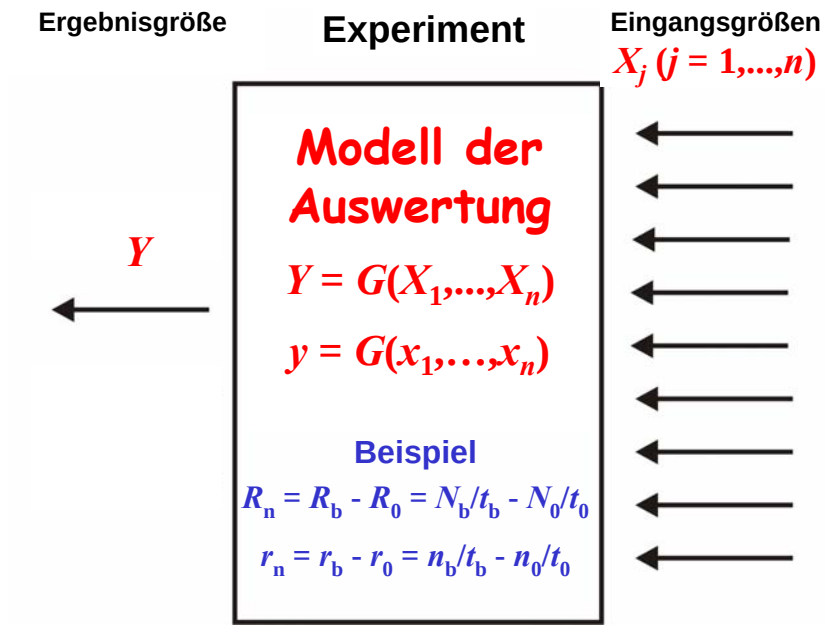
Dabei ist Y die Ergebnisgröße und die X_i die Eingabegrößen. Es wird angenommen, dass das Modell sinnvoll ist, sodass für die wahren Werte gilt:

$$\tilde{y} = G(\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_n)$$

Ein Schätzwert y von $\tilde{y}$ wird erhalten durch Einsetzen der Schätzwerte x_i der $\tilde{x}_i$ in die Modell Gleichung:

$$y = G(x_1, \ldots, x_n)$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

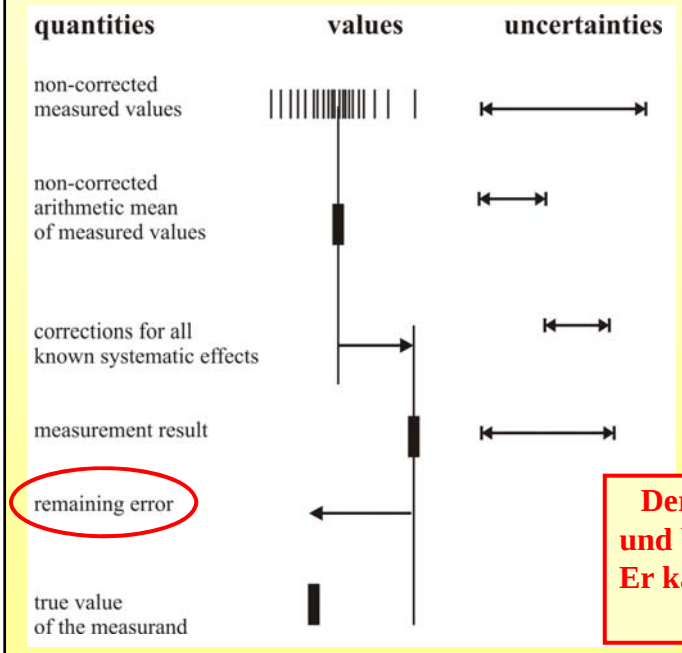


R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Größen und Definitionen

- Messgröße Y
- (wahrer) Wert der Messgröße $\tilde{y}$
- Information, die vor der Messung verfügbar ist $\Im$
- Messergebnis als Schätzwert des wahren Wertes der Messgröße y
- Standardmessunsicherheit $u(y)$
- Charakteristische Grenzen:
  - Erkennungsgrenze y^*
  - Nachweisgrenze $y^\#$
  - Vertrauensgrenzen $y^\triangleleft$ $y^\triangleright$
- Bester Schätzwert und seine Unsicherheit $\hat{y}$ $u(\hat{y})$
- Modell der Auswertung G

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover



Mit dem GUM machen wir keine Fehler mehr, wir sind nur unsicher!

Der wahre Wert ist und bleibt unbekannt. Er kann nur geschätzt werden.

ISO GUM (1995)

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Institut für Radioökologie und Strahlenschutz
Leibniz Universität Hannover

Inhalt

- Stand der Normung
- Einige Grundlagen der Metrologie
- All unser Wissen: PDFs!
- Einige Anmerkungen zur Wahrscheinlichkeit
- Eine Bayes'sche Theorie der Messunsicherheiten
- ISO GUM und GUM Supplement I
- Messunsicherheiten nach dem GUM
- Charakteristische Grenzen nach ISO 11929
- Einige einfache Beispiele

$$f(\tilde{y}|y,\mathfrak{I})$$

Das metrologische Problem kann allgemein so formuliert werden:

Gesucht wird die Funktion (PDF)

$$f\left(\tilde{y}\middle|y,\mathfrak{I}\right)$$

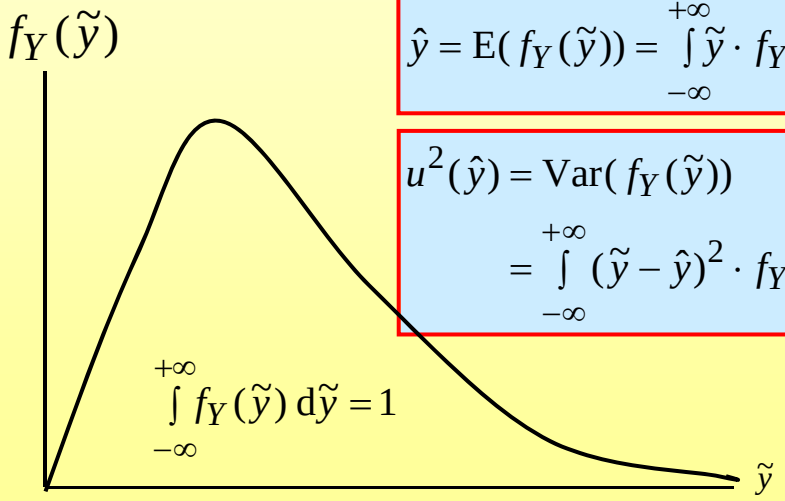
y **Das Messergebnis, der Messwert**

$\mathfrak{I}$ **Sonstige verfügbare Information**

Sei $f_Y(\tilde{y})$ die Wahrscheinlichkeitsdichte (probability density function PDF) einer Zufallsvariablen die als Schätzer von Y dient

$$\hat{y} = \mathrm{E}(f_Y(\tilde{y})) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{y} \cdot f_Y(\tilde{y})\,\mathrm{d}\tilde{y}$$

$$u^2(\hat{y}) = \mathrm{Var}(f_Y(\tilde{y})) = \int_{-\infty}^{+\infty} (\tilde{y} - \hat{y})^2 \cdot f_Y(\tilde{y})\,\mathrm{d}\tilde{y}$$



$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_Y(\tilde{y})\,\mathrm{d}\tilde{y} = 1$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Gesucht wird die Funktion (PDF) $f\left(\tilde{y} \middle| y, \mathfrak{I}\right)$

y **Das Messergebnis, der Messwert**

$\mathfrak{I}$ **Sonstige verfügbare Information**

Thomas Bayes
*** 1702 † 1761**

Das Problem kann mit einer Bayes'schen Theorie der Messunsicherheit gelöst werden.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Bayes gegen frequentistische Statistik

$f\left(\tilde{y}|y,\Im\right)$ & $f\left(y|\tilde{y}\right)$ $\qquad$ $f\left(y|\tilde{y}\right)$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Institut für Radioökologie und Strahlenschutz
Leibniz Universität Hannover

Inhalt

- Stand der Normung
- Einige Grundlagen der Metrologie
- All unser Wissen: PDFs!
- **Einige Anmerkungen zur Wahrscheinlichkeit**
- Eine Bayes'sche Theorie der Messunsicherheiten
- ISO GUM und GUM Supplement I
- Messunsicherheiten nach dem GUM
- Charakteristische Grenzen nach ISO 11929
- Einige einfache Beispiele

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Das Problem mit dem GUM

Die Anwender des GUM leben in zwei verschiedenen Welten:

Der Welt der Bayes Statistik und
der Welt der frequentistischen Statistik.

Der Begriff Wahrscheinlichkeit hat in den beiden Welten der Statistik nicht die gleiche Bedeutung !!!

Obwohl viele Ergebnisse der beiden Statistiken nahezu gleich sind, dürfen sie nicht miteinander verwechselt oder vermischt werden.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Frequentistische und Bayessche Wahrscheinlichkeit

Die frequentistische Ansicht ist:

Wahrscheinlichkeit ist der stochastische Grenzwert relativer Häufigkeiten.

Die Bayessche Ansicht ist:

Wahrscheinlichkeit ist ein Maß für das Vertrauen, dass ein Individuum in die Gültigkeit einer unsicheren Annahme setzt.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Wahrscheinlichkeiten und Häufigkeiten

- Nicht jede Häufigkeitsverteilung (frequency distribution) kann als Wahrscheinlichkeits-dichte interpretiert werden.
- Nicht jede Wahrscheinlichkeit kann mittels einer Häufigkeit beschrieben werden.

Das Problem mit der frequentistischen Statistik:

Wie soll man Typ B Unsicherheiten berücksichtigen?

Es ist unmöglich !!!

Nur Bayes-Statistik kann Typ B Unsicherheiten berücksichtigen.

Würfeln mit Bayesianern und Frequentisten

Frage:

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit eine „6“ zu würfeln?

Antwort des Bayesianers:

1/6

Antwort des Frequentisten:

Ich weiß es nicht, ich habe noch nicht gewürfelt.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Erkennungsgrenze und Nachweisgrenze

Frequentist	Bayesianer
Hypothesentest	Entscheiden auf der Grundlage von Wahrscheinlichkeiten
α Fehler 1. Art β Fehler 2. Art	
$H_0 : \tilde{y} = 0$ $H_1 : \tilde{y} > 0$	$P(\tilde{y} = 0) = ?$ $P(\tilde{y} > 0) = ?$ $P(y^{\triangleleft} \le \tilde{y} \le y^{\triangleright}) = ?$

Relevante Wahrscheinlichkeiten

$$P(y > y^* | \tilde{y} = 0) = \alpha \qquad P(y < y^* | \tilde{y} = y^{\#}) = \beta$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Institut für Radioökologie und Strahlenschutz
Leibniz Universität Hannover

Inhalt

- Stand der Normung
- Einige Grundlagen der Metrologie
- All unser Wissen: PDFs!
- Einige Anmerkungen zur Wahrscheinlichkeit
- **Eine Bayes'sche Theorie der Messunsicherheiten**
- **ISO GUM und GUM Supplement I**
- Messunsicherheiten nach dem GUM
- Charakteristische Grenzen nach ISO 11929
- Einige einfache Beispiele

Das metrologische Problem kann allgemein so formuliert werden:

Gesucht wird die Funktion (PDF)

$$f\left(\tilde{y}\middle|y,\mathfrak{I}\right)$$

y Das Messergebnis, der Messwert

$\mathfrak{I}$ Sonstige verfügbare Information

Die PDF hängt von der verfügbaren Information ab !

- Der **GUM** machte noch keine klare Aussage zu seinen statistischen Grundlagen.
- Das **GUM Supplement** enthält klar die Aussage, dass der GUM auf der Grundlage der Bayes-Statistik abgeleitet ist.
- Das **GUM Supplement** benutzt das PME zur Ableitung verschiedener PDFs in Abhängigkeit von der verfügbaren Information.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Thomas Bayes (* 1702 † 1761)

1763:
„Essay Towards Solving a Problem in the Doctrine of Chances“

„Bayesian estimation“, i.e. calculating the probability of the validity of a proposition on the basis of a prior estimate of its probability and new relevant evidence.

$$f(\tilde{y}|y,\Im) = f(\tilde{y}|\Im)\cdot f_0(\tilde{y}|y)$$

posterior **model prior** **data prior**

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

E.T. Jaynes

**Probability Theory:
The Logic of Science**

Das *Prinzip der maximalen (Informations-) Entropie (PME)* fordert

5.7.1922 – 30.4.1998

$$S = -\int_{-\infty}^{+\infty} f_X(\tilde{x}|x) \cdot \ln f_X(\tilde{x}|x)\, \mathrm{d}\tilde{x} = \max$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

GUM Ansatz mittels Bayes-Statistik I

Wir suchen $f(\tilde{y}|y,\Im)$

Ansatz $f(\tilde{y}|y,\Im) = f_0(\tilde{y}|y) \cdot f(\tilde{y}|\Im)$

Daten Prior $f_0(\tilde{y}|y)$

Model Prior $f(\tilde{y}|\Im)$

Nebenbedingungen $y = \mathrm{E}(f_0(\tilde{y}))$

$u^2(y) = \mathrm{Var}(f_0(\tilde{y}|y))$

K. Weise, W. Wöger, PTB-Bericht N-11, 1992; K. Weise, Kerntechnik 63 (1997) 214 - 224

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

GUM Ansatz mittels Bayes-Statistik I

Das Prinzip der maximalen Informationsentropie (Jaynes, 1982)

$$S = -\int f_0(\tilde{y}|y)\cdot \ln\left(f_0(\tilde{y}|y)\right) \mathrm{d}\tilde{y} = \max$$

mit den Nebenbedingungen $y = \mathrm{E}\left(f_0(\tilde{y}|y)\right)$

$$u^2(y) = \mathrm{Var}\left(f_0(\tilde{y}|y)\right)$$

führt zur Lösung:

$$\boxed{f(\tilde{y}|y,\Im) = C\cdot f(\tilde{y}|\Im)\cdot \exp\left(-(\tilde{y}-y)^2/(2\cdot u^2(y))\right)}$$

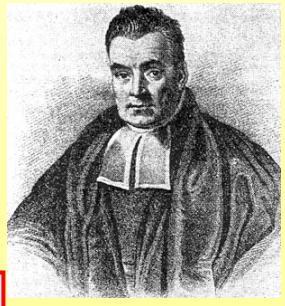
Dies ist weder eine Näherung noch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung in wiederholten oder zählenden Messungen.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

GUM Ansatz mittels Bayes-Statistik II

Mit $f(\tilde{y}|y,\Im) = C\cdot f(\tilde{y}|\Im)\cdot \exp\left(-(\tilde{y}-y)^2/(2\cdot u^2(y))\right)$ $(\tilde{y}\geq 0)$

und dem Bayes Theorem



$$P(A|B)P(B) = P(B|A)P(A)$$

erhält man $f(\tilde{y}|y)\cdot f(y|\Im) = f(y|\tilde{y})\cdot f(\tilde{y}|\Im)$

und so $\boxed{f(y|\tilde{y}) = C\cdot \exp\left(-(\tilde{y}-y)^2/(2\cdot u^2(y))\right)}$

da $f(y|\Im)$ **konstant ist.**

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

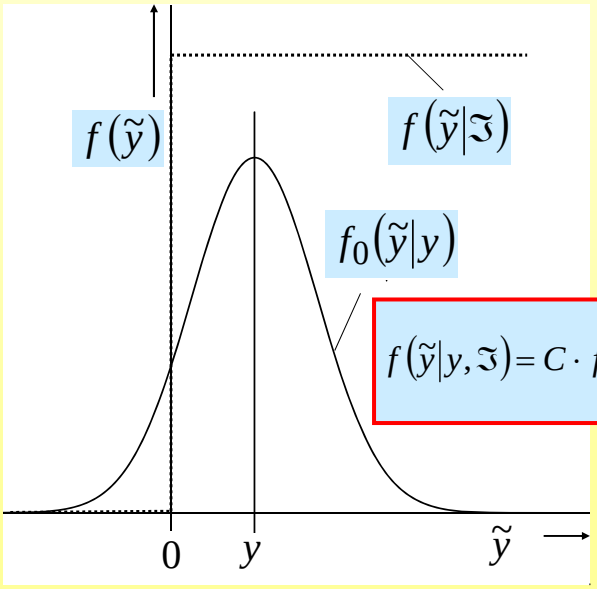
GUM Ansatz mittels Bayes-Statistik IV

$f(\tilde{y}|\Im)$ **enthält alle Information, die vor Durchführung des Experimentes existiert; darum ist sie unabhängig von** y**.**

Beispiel:
Ein Modell Prior für eine nicht negative Messgröße

$$\tilde{y} \geq 0 \qquad f(\tilde{y}) = \begin{cases} \text{const} & (\tilde{y} \geq 0) \\ 0 & (\tilde{y} < 0) \end{cases}$$

$f(\tilde{y}|y,\Im)$ für eine nicht negative Messgröße



$$f(\tilde{y}|y,\Im) = C \cdot f(\tilde{y}|\Im) \cdot \exp\left(-\frac{(\tilde{y}-y)^2}{2 \cdot u^2(y)}\right)$$

Beispiel für eine PDF

Die vorhandene Information sei, dass x im Intervall

$$[x_{\max}, x_{\min}]$$

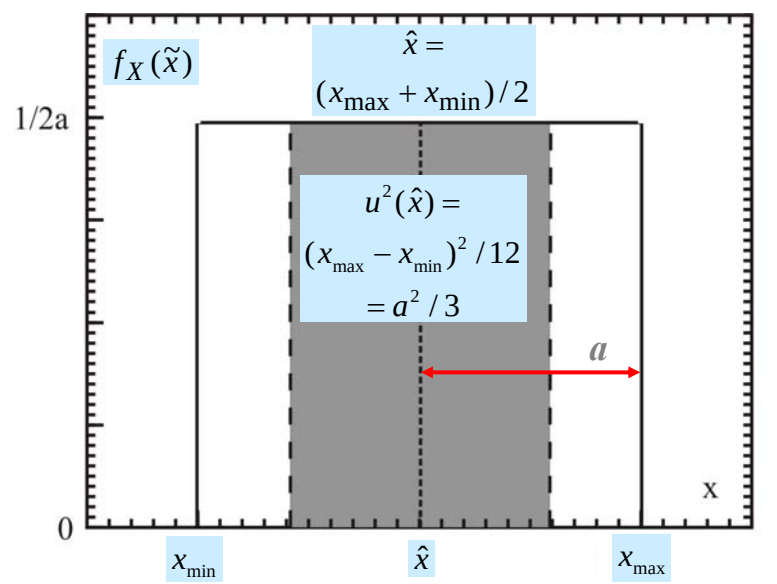
liegt.

Frage: Was ist der beste Schätzwert $\hat{x}$ von X und wie groß ist seine Unsicherheit?

Antwort: $f_X(\tilde{x})$ ist eine Rechteckverteilung.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Die Rechteckverteilung: eine PDF



$(x_{\max} - x_{\min}) = 2a$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Available information	Assigned PDF and illustration (not to scale)
Lower and upper limits a, b	Rectangular: $\mathrm{R}(a,b)$
Inexact lower and upper limits $a \pm d$, $b \pm d$	Curvilinear trapezoid: $\mathrm{CTrap}(a,b,d)$
Sum of two quantities assigned rectangular distributions with lower and upper limits a_1, b_1 and a_2, b_2	Trapezoidal: $\mathrm{Trap}(a,b,\beta)$ with $a = a_1 + a_2$, $b = b_1 + b_2$, $\beta = [(b_1 - a_1) - (b_2 - a_2)]/(b - a)$
Sum of two quantities assigned rectangular distributions with lower and upper limits a_1, b_1 and a_2, b_2 and the same semi-width ($b_1 - a_1 = b_2 - a_2$)	Triangular: $\mathrm{T}(a,b)$ with $a = a_1 + a_2$, $b = b_1 + b_2$
Sinusoidal cycling between lower and upper limits a, b	Arc sine (U-shaped): $\mathrm{U}(a,b)$
Best estimate x and associated standard uncertainty $u(x)$	Gaussian: $\mathrm{N}(x, u^2(x))$
Best estimate $\boldsymbol{x}$ of vector quantity and associated uncertainty matrix $\boldsymbol{U_x}$	Multivariate Gaussian: $\mathrm{N}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{U_x})$
Series of indications $x_1, \ldots, x_n$ sampled independently from a quantity having a Gaussian distribution, with unknown expectation and unknown variance	Scaled and shifted t: $\mathrm{t}_{n-1}(\bar{x}, s^2/n)$ with $\bar{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i/n$, $s^2 = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2/(n-1)$
Best estimate x, expanded uncertainty U_p, coverage factor k_p and effective degrees of freedom ν_{eff}	Scaled and shifted t: $\mathrm{t}_{\nu_{\mathrm{eff}}}(x, (U_p/k_p)^2)$
Best estimate x of non-negative quantity	Exponential: $\mathrm{Ex}(1/x)$
Number q of objects counted	Gamma: $\mathrm{G}(q+1, 1)$

Ein Appetithappen aus dem GUM/Supplement I

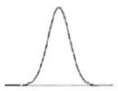
Die PDFs hängen von der verfügbaren Information ab.

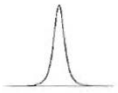
www.bipm.org

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Verfügbare Information führt zu der PDF

Sinusoidal cycling between lower and upper limits a, b	Arc sine (U-shaped): $\mathrm{U}(a,b)$
GUM Best estimate x and associated standard uncertainty $u(x)$	Gaussian: $\mathrm{N}(x, u^2(x))$
Best estimate $\boldsymbol{x}$ of vector quantity and associated uncertainty matrix $\boldsymbol{U_x}$	Multivariate Gaussian: $\mathrm{N}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{U_x})$
Series of indications $x_1, \ldots, x_n$ sampled independently from a quantity having a Gaussian distribution, with unknown expectation and unknown variance	Scaled and shifted t: $\mathrm{t}_{n-1}(\bar{x}, s^2/n)$ with $\bar{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i/n$, $s^2 = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2/(n-1)$





ISO GUM/Supplement (2008)

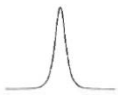
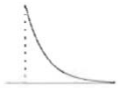
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Verfügbare Information führt zu der PDF

Lower and upper limits a, b	Rectangular: $\mathrm{R}(a, b)$	
Inexact lower and upper limits $a \pm d$, $b \pm d$	Curvilinear trapezoid: $\mathrm{CTrap}(a, b, d)$	
Sum of two quantities assigned rectangular distributions with lower and upper limits a_1, b_1 and a_2, b_2	Trapezoidal: $\mathrm{Trap}(a, b, \beta)$ with $a = a_1 + a_2$, $b = b_1 + b_2$, $\beta = \lvert(b_1 - a_1) - (b_2 - a_2)\rvert/(b - a)$	
Sum of two quantities assigned rectangular distributions with lower and upper limits a_1, b_1 and a_2, b_2 and the same semi-width $(b_1 - a_1 = b_2 - a_2)$	Triangular: $\mathrm{T}(a, b)$ with $a = a_1 + a_2$, $b = b_1 + b_2$	

ISO GUM/Supplement (2008) R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Verfügbare Information führt zu der PDF

Best estimate x, expanded uncertainty U_p, coverage factor k_p and effective degrees of freedom ν_{eff}	Scaled and shifted t: $\mathrm{t}_{\nu_{\mathrm{eff}}}(x, (U_p/k_p)^2)$	
Best estimate x of non-negative quantity	Exponential: $\mathrm{Ex}(1/x)$	
Number q of objects counted	Gamma: $\mathrm{G}(q + 1, 1)$	

… und es gibt empirische PDFs.

Free download under www.bipm.org

ISO GUM/Supplement (2008) R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Institut für Radioökologie und Strahlenschutz
Leibniz Universität Hannover

Inhalt

- Stand der Normung
- Einige Grundlagen der Metrologie
- All unser Wissen: PDFs!
- Einige Anmerkungen zur Wahrscheinlichkeit
- Eine Bayes'sche Theorie der Messunsicherheiten
- ISO GUM und GUM Supplement I
- **Messunsicherheiten nach dem GUM**
- Charakteristische Grenzen nach ISO 11929
- Einige einfache Beispiele

Messunsicherheiten nach dem GUM

Einem Messwert y ist eine Messunsicherheit $u(y)$ zugeordnet.

Der ISO-Guide unterscheidet zwei Arten, wie Messunsicherheiten ermittelt werden:
Typ A und **Typ B**.

Typ A Unsicherheiten werden als Standard-abweichungen aus mehrfach wiederholten Messungen oder aus zählenden Messungen, z.B. über $u^2(n) = n$, ermittelt.

Typ B Unsicherheiten stammen aus anderen Quellen.

Typ A Unsicherheiten

Typ A Unsicherheiten sind solche, die sich bei mehrfach wiederholten Messungen mit den Beobachtungen x_k zufällig verhalten.

Man erhält als besten Schätzwert für den wahren Wert der Messgröße X:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} x_k$$

Mit der Standardunsicherheit:

$$s(\bar{x}) = \sqrt{\frac{1}{(n-1)} \cdot \sum_{k=1}^{n} (x_k - \bar{x})^2}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Typ A Unsicherheiten

Beispiel Nettozählrate:

$$R_\mathrm{n} = \frac{N_\mathrm{g}}{t_\mathrm{g}} - \frac{N_0}{t_0}$$

Messergebnis:

$$r_\mathrm{n} = \frac{n_\mathrm{g}}{t_\mathrm{g}} - \frac{n_0}{t_0}$$

Bei zählenden Messungen eines Poisson-Prozesses, ist die Standardabweichung gegeben durch:

$$u^2(r_\mathrm{n}) = \frac{n_g}{t_\mathrm{g}^2} + \frac{n_0}{t_0^2}$$

$$\boxed{u^2(n) = n}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Type B Uncertainties

Typ B Messunsicherheiten können nicht durch mehrfach wiederholte Messungen gewonnen werden.

Sie müssen aus wissenschaftlicher Beurteilung aller verfügbaren Informationen über die mögliche Variabilität der x_i bzw. der X_i.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Typ B Unsicherheiten

Die Gesamtheit der zu berücksichtigenden Information aus anderen Quellen kann umfassen:

- früher gemessene Daten
- Erfahrung oder allgemeines Wissen über das Verhalten oder die Eigenschaften der relevanten Materialien, Phänomene und Instrumente
- Spezifikationen und Herstellerangaben
- Daten aus Kalibrierungs- oder anderen Zertifikaten
- Unsicherheiten, die in Handbüchern entsprechenden Daten zugeordnet sind.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Der GUM

- ein minimalistischer Spezialfall -

Messunsicherheiten nach dem GUM

- nur für linearisierbare Modelle -

Nur die Nebenbedingungen:

$$y = \mathrm{E}\left(f_0(\tilde{y})\right)$$

$$u^2(y) = \mathrm{Var}\left(f_0(\tilde{y}|y)\right)$$

Die Messunsicherheiten des GUM sind das Ergebnis einer Taylorreihenentwicklung, die nach dem ersten Glied abgebrochen wird.

Standardmessunsicherheiten

Die (kombinierte) Standardmessunsicherheit $u(y)$ von y wirde im Fall nicht korrelierter, voneinander unabhängiger Eingangsdaten X_i in der bekannten Form des „Fehlerfortpflanzungs-Gesetzes“ berechnet:

$$u^2(y) = \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial G}{\partial X_i} \right)^2 \cdot u^2(x_i) = \sum_{i=1}^{m} \left(c_i \cdot u(x_i) \right)^2 \equiv \sum_{i=1}^{m} u_i^2(y)$$

Mit den Sensitivitätskoeffizienten:

$$c_i \equiv \left. \frac{\partial G}{\partial X_i} \right|_{x_1,\ldots,x_m} \quad \text{und} \quad u_i(y) \equiv |c_i| \cdot u(x_i)$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Standardmessunsicherheit $u(y)$ nach dem GUM

Für ein Modell der Auswertung $y = G(x_i, i = 1,\ldots,m)$ kann die Standardmessunsicherheit $u(y)$ der Mess- oder Ergebnisgröße Y zum Mess- oder Ergebniswert y mit den Korrelationskoeffizienten $r(x_i,x_j)$, den Standardunsicherheiten $u(x_i)$ der x_i und den Sensitivitätskoeffizienten c_i geschrieben werden als:

$$u^2(y) = \sum_{i,j=1}^{m} \frac{\partial G}{\partial x_i} \frac{\partial G}{\partial x_j} u(x_i, x_j) \qquad \boxed{c_i \equiv \partial G / \partial X_i}$$

$$= \sum_{i=1}^{m} c_i^2 \cdot u^2(x_i) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^{m} c_i \cdot c_j \cdot u(x_i) \cdot u(x_j) \cdot r(x_i, x_j)$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Standardmessunsicherheiten

Die (kombinierte) Standardmessunsicherheit $u(y)$ zu y wirde im Fall nicht korrelierter, voneinander unabhängiger Eingangsdaten X_i in der bekannten Form des „Fehlerfortpflanzungs-Gesetzes“ berechnet:

$$u^2(y) = \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial G}{\partial X_i} \right)^2 \cdot u^2(x_i) = \sum_{i=1}^{m} \left(c_i \cdot u(x_i) \right)^2 \equiv \sum_{i=1}^{m} u_i^2(y)$$

Mit den Sensitivitätskoeffizienten:

$$c_i \equiv \left. \frac{\partial G}{\partial X_i} \right|_{x_1,\ldots,x_m}$$

und $u_i(y) \equiv |c_i| \cdot u(x_i)$.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Partielle Ableitungen und Differentenquotienten

In Fällen, in denen die partiellen Ableitungen nicht explizit verfügbar sind, können sie numerisch hinreichend approximiert werden, z. B. indem man die Standardunsicherheit $u(x_k)$ als Inkrement der x_k benutzt:

$$\frac{\partial G_k}{\partial x_i} = \frac{1}{u(x_i)} \cdot \left(G_k\left(x_1,\ldots,x_i + u(x_i)/2,\ldots,x_m\right) - G_k\left(x_1,\ldots,x_i - u(x_i)/2,\ldots,x_m\right) \right)$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Einfache Berechnungen für unabhängige Eingangsgrößen

$$y = \sum_{i=1}^{n} (\pm x_i) \Rightarrow u^2(y) = \sum_{i=1}^{n} u^2(x_i)$$

$$u_{\mathrm{rel}}(x) = u(x)/x$$

$$y = \frac{\prod_{i=1}^{n} x_i}{\prod_{j=1}^{m} z_i} \Rightarrow u_{\mathrm{rel}}^2(y) = \sum_{i=1}^{n} u_{\mathrm{rel}}^2(x_i) + \sum_{j=1}^{m} u_{\mathrm{rel}}^2(z_j)$$

Standardmessunsicherheit $u(y)$ nach dem GUM

Für ein Modell der Auswertung $y = G(x_i, i = 1,...,m)$ kann die Standardmessunsicherheit $u(y)$ der Mess- oder Ergebnisgröße Y zum Mess- oder Ergebniswert y mit den Korrelationskoeffizienten $r(x_i,x_j)$, den Standardunsicherheiten $u(x_i)$ der x_i und den Sensitivitätskoeffizienten c_i geschrieben werden als:

$$u^2(y) = \sum_{i,j=1}^{m} \frac{\partial G}{\partial x_i} \frac{\partial G}{\partial x_j} u(x_i, x_j) \qquad \boxed{c_i \equiv \partial G / \partial X_i}$$

$$= \sum_{i=1}^{m} c_i^2 \cdot u^2(x_i) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^{m} c_i \cdot c_j \cdot u(x_i) \cdot u(x_j) \cdot r(x_i, x_j)$$

Es könnte schlimmer kommen ….

Die Standardmessunsicherheiten des GUM sind das Ergebnis einer Taylorreihenentwicklung, die nach der ersten Ordnung abgebrochen wurde.

Wenn diese Näherung für ein Modell der Auswertung nicht ausreichend ist, kommt es schlimmer !

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

… und es kommt schlimmer:

Standard Unsicherheiten 2. Ordnung nach dem GUM

- If the model cannot be approximated by a 1st order Taylor expansion and
- if the distribution of each X_i is symmetric about its mean and
- if the X_i are not correlated, independent quantities X_i the combined standard uncertainty $u(y)$ is calculated by:

$$u^2(y) = \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial G}{\partial X_i} \right)^2 \cdot u^2(x_i)$$

$$+ 2 \cdot \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial X_i \partial X_j} \right)^2 + \left(\frac{\partial G}{\partial X_i} \frac{\partial^3 G}{\partial X_i \partial X_j^2} \right) \right) \cdot u^2(x_i) \cdot u^2(x_j)$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Das sollte niemand versuchen!

Dann lieber das GUM Supplement I anwenden und Monte Carlo Methoden verwenden.

Messung und Auswertung

- Mit Durchführung der Messungen erhält man Messergebnisse x_i mit den ihnen zugeordneten Unsicherheiten $u(x_i)$.
- Die Auswertung der Messung(en) nach dem GUM oder DIN 1319 Teil 3 und 4 ergibt vollständige Messergebnisse:

$$\{y_1, y_2, \ldots, y_n\}; \{u(y_1), \ldots, u(y_n)\}$$

Institut für Radioökologie und Strahlenschutz
Leibniz Universität Hannover

Inhalt

- Stand der Normung
- Einige Grundlagen der Metrologie
- All unser Wissen: PDFs!
- Einige Anmerkungen zur Wahrscheinlichkeit
- Eine Bayes'sche Theorie der Messunsicherheiten
- ISO GUM und GUM Supplement I
- Messunsicherheiten nach dem GUM
- **Charakteristische Grenzen nach ISO 11929**
- Einige einfache Beispiele

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

ISO 11929 auf der Grundlage des GUM

Erkennungs- und Nachweisgrenze und Grenzen des Überdeckungsbereichs bei Kernstrahlungsmessungen

Modell der Auswertung $y = G(x_1, \ldots, x_m)$

Messunsicherheiten nach dem GUM oder DIN 1319-3 und -4 im Fall nicht korrelierter Daten

$$u^2(y) = \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial G}{\partial x_i} \right)^2 u^2(x_i)$$

oder im Fall korrelierter Daten

$$u^2(y) = \sum_{i,j=1}^{m} \frac{\partial G}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial G}{\partial x_j} \cdot u(x_i, x_j)$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Charakteristische Grenzen

- Erkennungsgrenze
- Nachweisgrenze
- Grenzen des Vertrauens- oder Überdeckungsbereichs

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Konfusion der Terminologie in Deutschland

	Strahlungs-messung ISO 11929	Chemische Analytik DIN 32645	Qualitäts-sicherung DIN 55350-34
Nicht vereinbar mit Nulleffekt	Erkennungs-grenze	Nachweis-grenze	Erfassungs-grenze
Hinreichend nachweisbar	Nachweis-grenze	Erfassungs-grenze	Erfassungs-vermögen
Hinreichend genau nachweisbar	-	Bestimmungs-grenze	

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Allgemeine Problemstellung

- Bei Kernstrahlungsmessungen muss die Strahlung einer Probe radioaktiven Materials in Gegenwart eines Untergrundes der natürlichen Umgebungsstrahlung gemessen werden.
- In der Spurenanalytik muss die Konzentration eines Elements, einer Verbindung oder eines Radionuklids gegen einen analytischen Blindwert bestimmt werden.
- Generell muss in der Metrologie der wahre Wert eines nicht-negativen Messgröße Y durch einen unsicheren Messwert y geschätzt werden.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Grenzen des Nachweises

Durch die natürliche Umgebungsstrahlung, durch Blindwerte und Messunsicherheiten wird das Nachweisvermögen von Messungen nach unten hin begrenzt.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Drei Fragen

- Ist unter den gemessenen Kernstrahlungs-ereignissen ein Beitrag der Probe?
- Wie groß ist der kleinste Probenbeitrag, der zuverlässig nachgewiesen werden kann?
- Falls ein Probenbeitrag erkannt wurde, wie groß ist der Wertebereich der Messgröße, der mit großer Sicherheit den wahren Wert der Messgröße enthält?

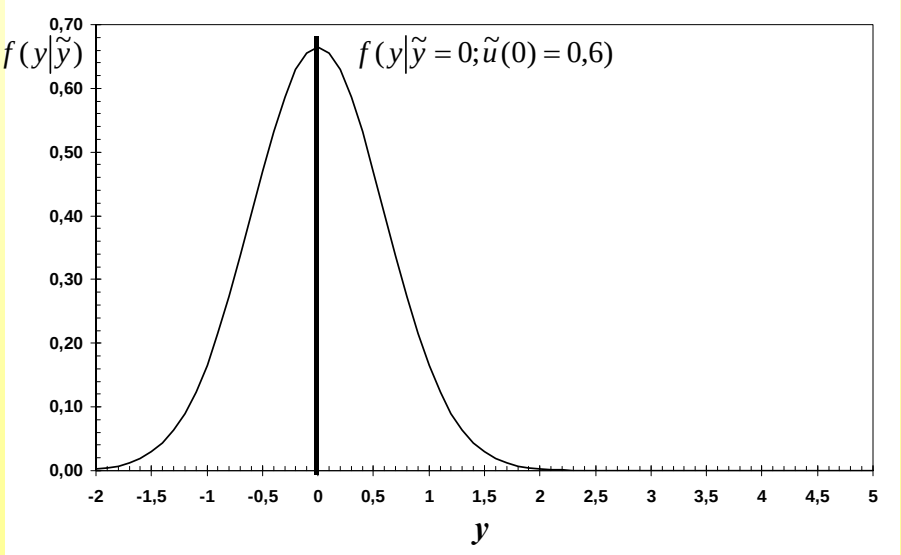
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Die drei Fragen werden mit dem Konzept der charakteristischen Grenzen beantwortet.

- die **Erkennungsgrenze** (decision threshold) entscheidet die Frage, ob unter den gemessenen Signalen ein Beitrag der Probe ist.
- die **Nachweisgrenze** (detection limit) nennt den kleinsten wahren Wert des Probenbeitrages, der zuverlässig gemessen werden kann.
- die **Vertrauensgrenzen** (confidence limits) schließen einen ***Vertrauensbereich*** **(Überdeckungsbereich, coverage interval)** ein, der den wahren Wert der Messgröße mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit enthält.

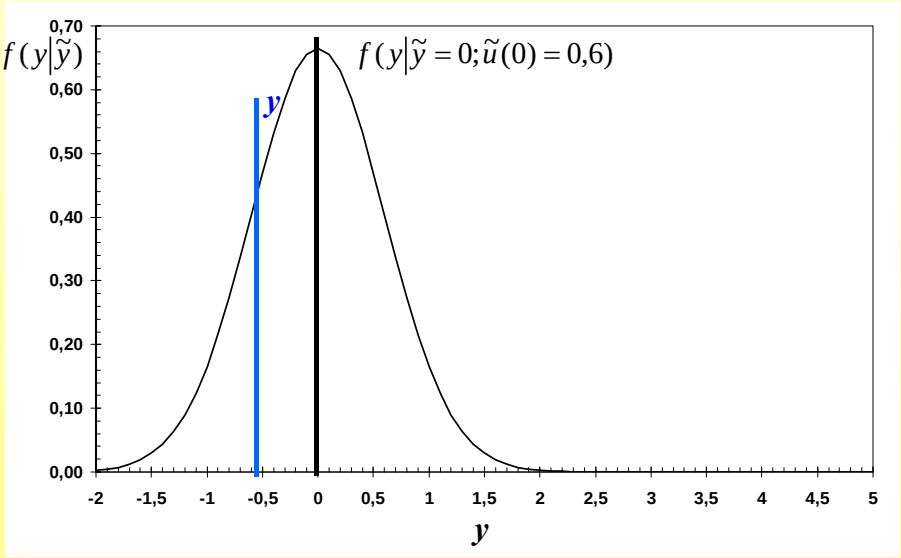
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

$y = x_1 - x_0$



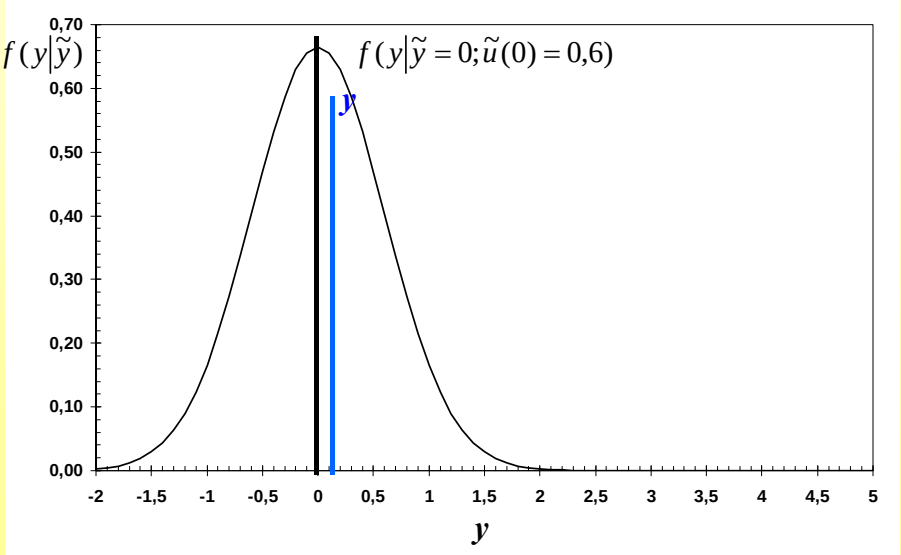
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

$y = x_1 - x_0$



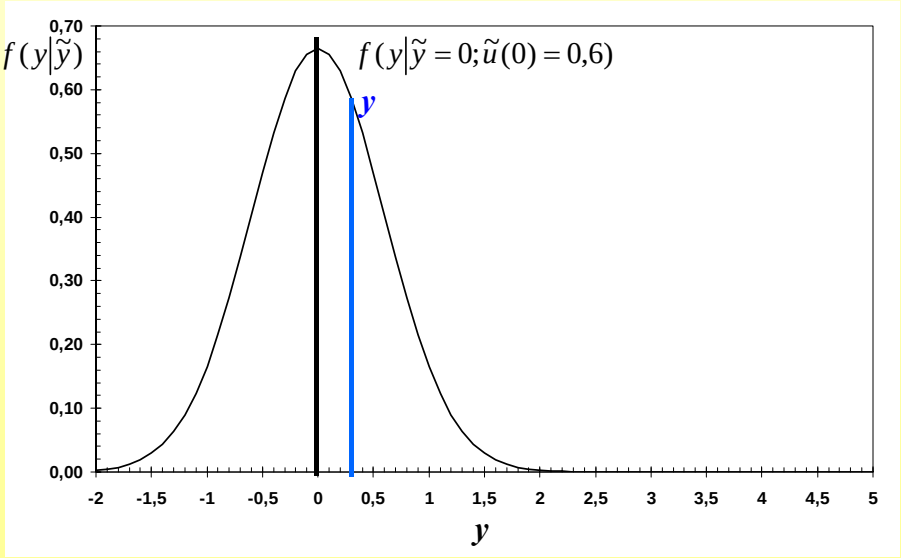
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

$y = x_1 - x_0$



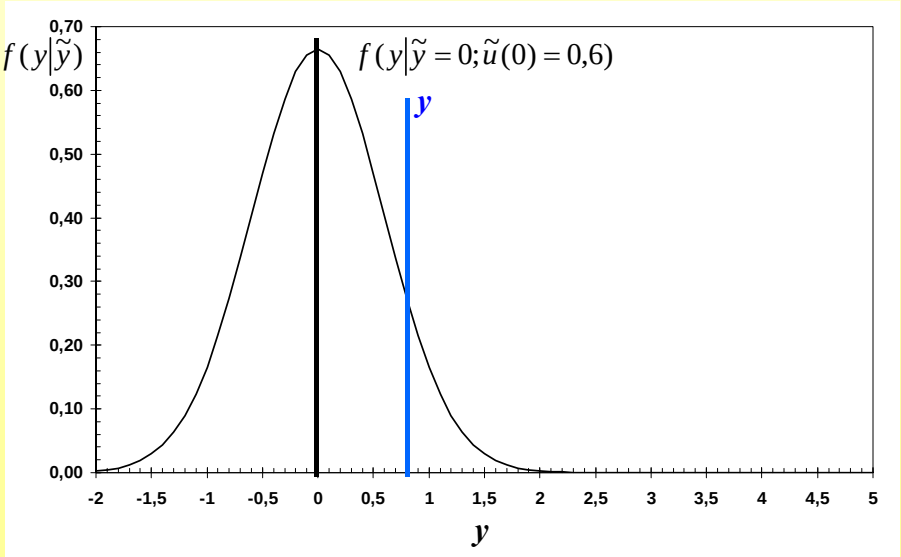
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

$y = x_1 - x_0$



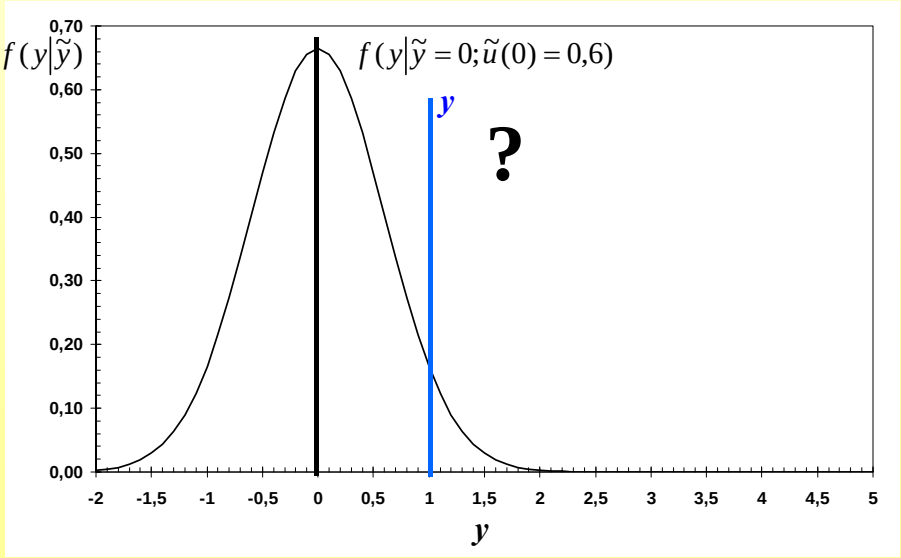
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

$y = x_1 - x_0$



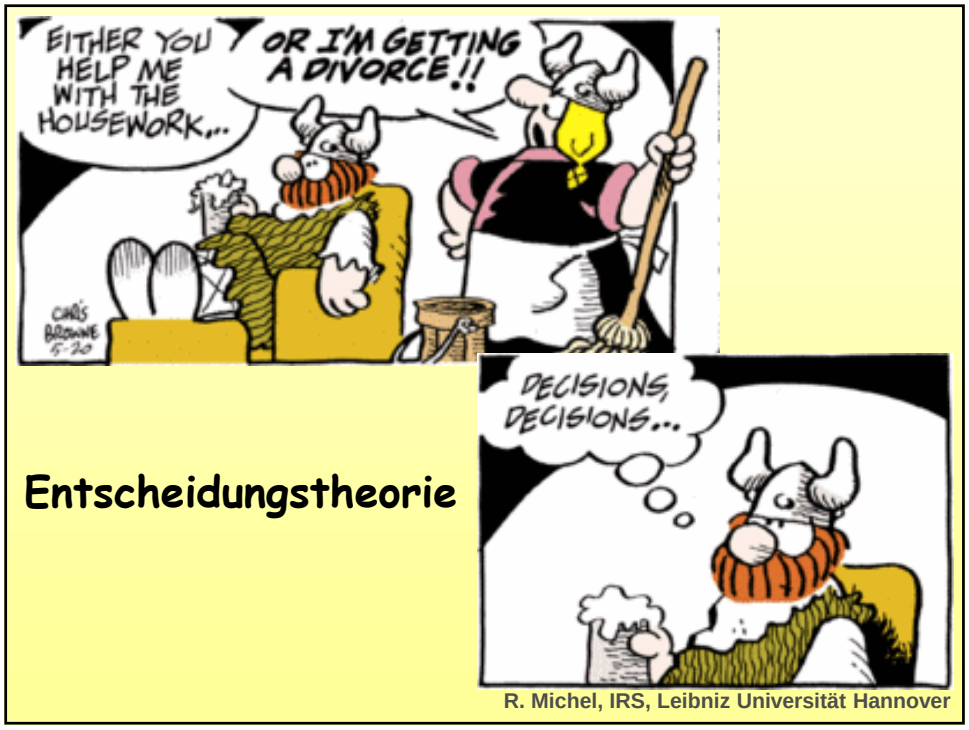
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

$y = x_1 - x_0$

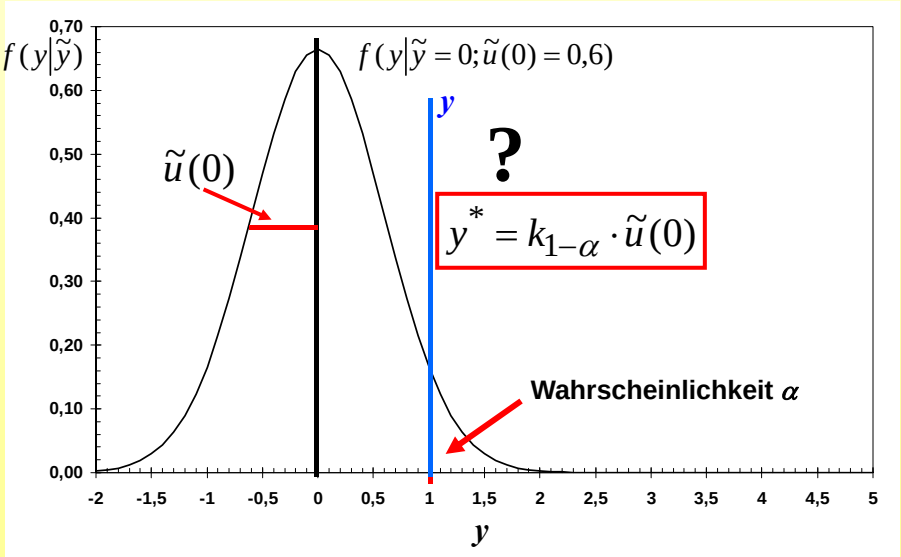


R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Victor Vasnetsov, Knight at the Cross-roads, 1882, The Russian Museum St. Petersburg

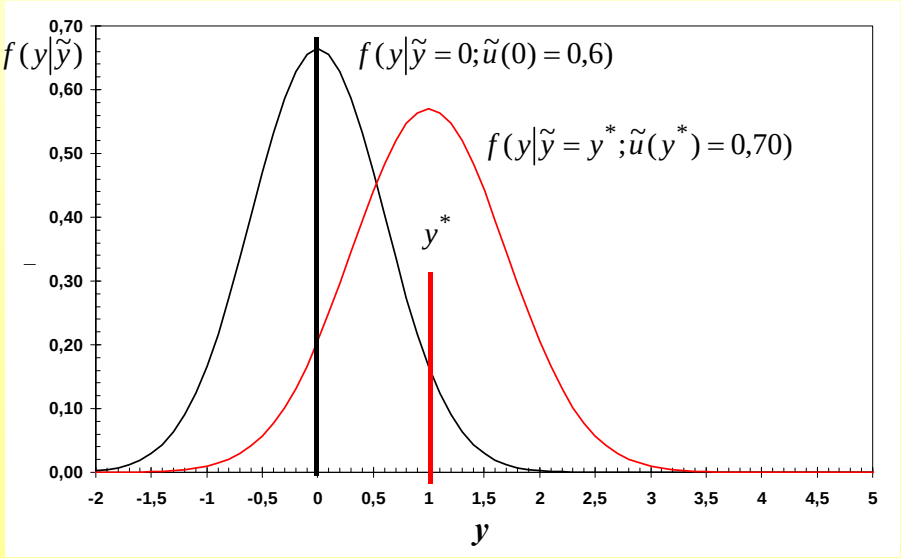


$y = x_1 - x_0$: Erkennungsgrenze y^*



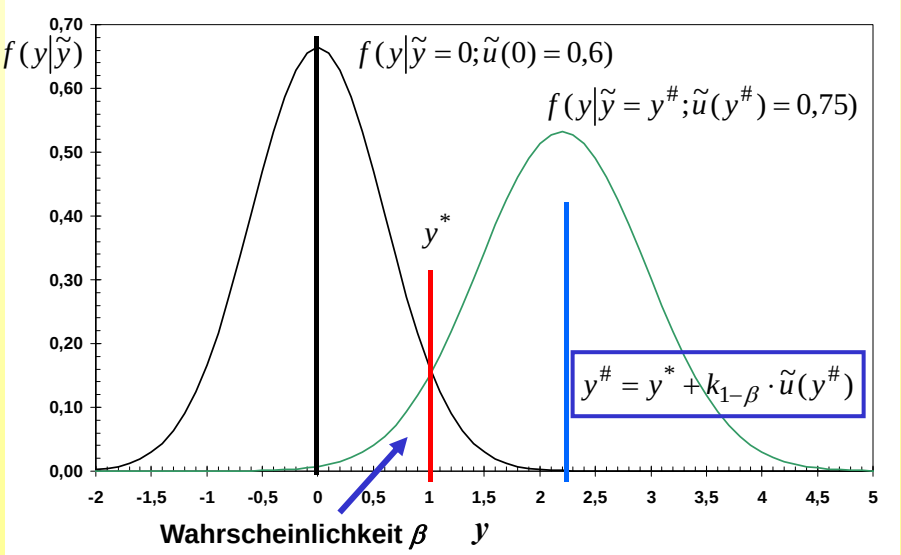
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

$y = x_1 - x_0$: was jetzt?



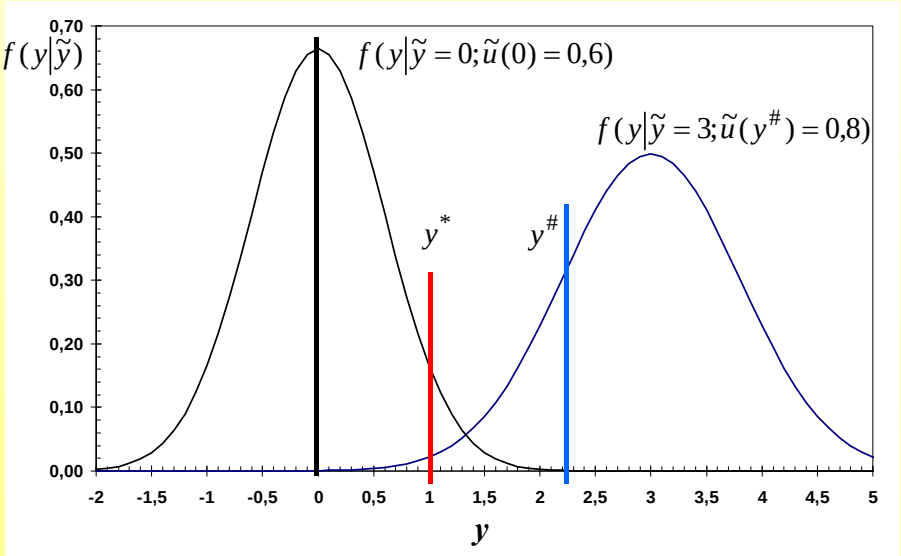
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

$y = x_1 - x_0$: Nachweisgrenze $y^{\#}$



R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

$y = x_1 - x_0$: y > Nachweisgrenze

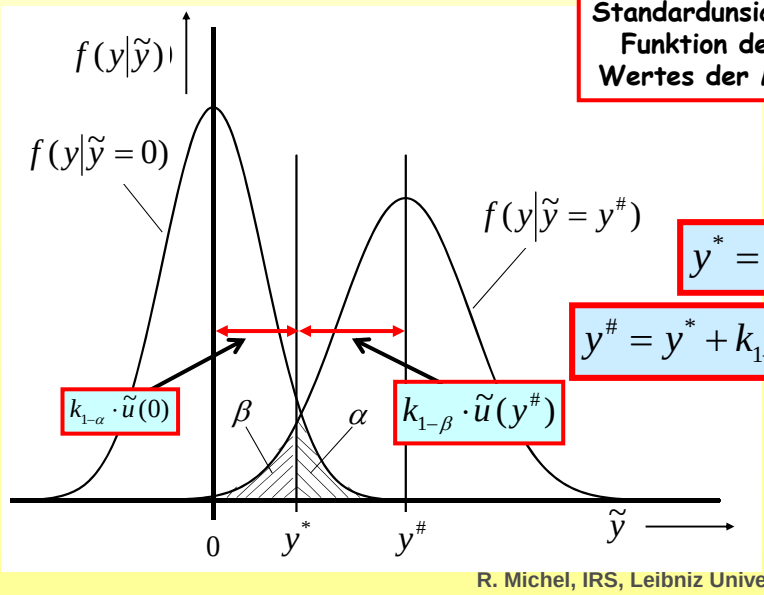


R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

ISO 11929: Erkennungsgrenze y^* und Nachweisgrenze $y^\#$

Standardunsicherheit als Funktion des wahren Wertes der Messgröße:

$$\tilde{u}(\tilde{y})$$



$$y^* = k_{1-\alpha}\cdot\tilde{u}(0)$$

$$y^\# = y^* + k_{1-\beta}\cdot\tilde{u}(y^\#)$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Die Definition der charakteristischen Grenzen.

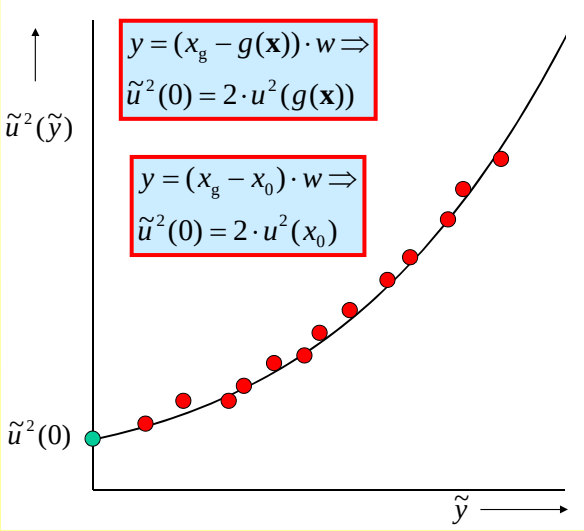
$$P(y > y^* | \tilde{y}=0) = \int_{y^*}^{\infty} f(y|\tilde{y}=0)\,\mathrm{d}y = \alpha$$

$$P(y < y^* | \tilde{y}=y^\#) = \int_{-\infty}^{y^*} f(y|\tilde{y}=y^\#)\,\mathrm{d}y = \beta$$

$$P(\tilde{y} > y^\triangleright | y) = \int_{y^\triangleright}^{\infty} f(\tilde{y}|y)\,\mathrm{d}\tilde{y} = \gamma/2$$

$$P(\tilde{y} < y^\triangleleft | y) = \int_{-\infty}^{y^\triangleleft} f(\tilde{y}|y)\,\mathrm{d}\tilde{y} = \gamma/2$$

Standardunsicherheit $\tilde{u}(\tilde{y})$ als Funktion des (wahren) Wertes $\tilde{y}$ der Messgröße



ISO 11929 gibt explizite Formeln $\tilde{u}(\tilde{y})$ für eine Vielzahl von Messaufgaben an.

$$u^2(y) = \tilde{u}^2(\tilde{y})$$

$\tilde{u}(\tilde{y})$ **kann auch experimentell bestimmt werden.**

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Berechnung von Erkennungs- und Nachweisgrenze

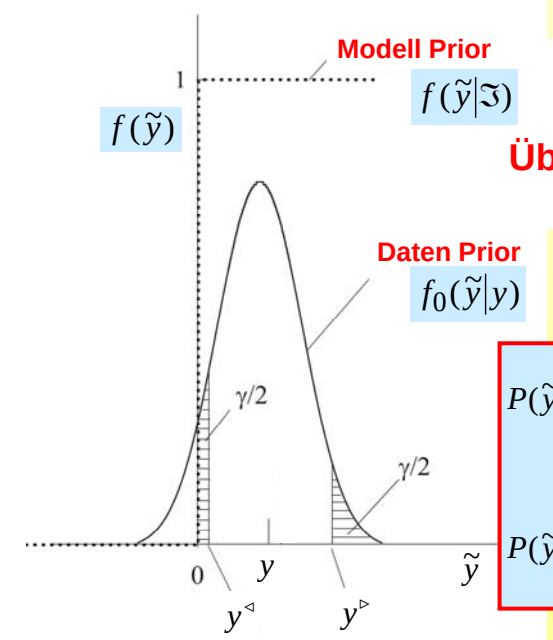
Wahl von α und β, e.g. $\alpha = \beta = 0{,}05$.

Bestimmung von y, $u(y)$ und $\tilde{u}(\tilde{y})$, speziell von $\tilde{u}(0)$.

Erkennungsgrenze $y^* = k_{1-\alpha} \cdot \tilde{u}(0)$

Nachweisgrenze $y^\# = y^* + k_{1-\beta} \cdot \tilde{u}(y^\#)$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

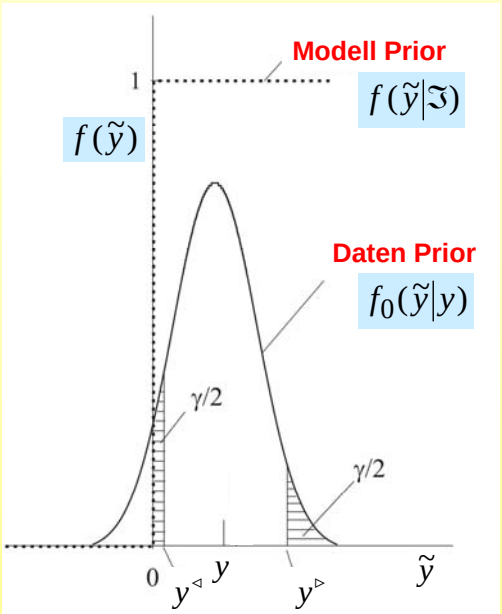


Grenzen des Vertrauens- oder Überdeckungsbereichs $y^{\triangleleft}$ und $y^{\triangleright}$

$$P(\tilde{y} < y^{\triangleleft}|y) = \int_{-\infty}^{y^{\triangleleft}} f(\tilde{y}|y)\,\mathrm{d}\tilde{y} = \gamma/2$$

$$P(\tilde{y} > y^{\triangleright}|y) = \int_{y^{\triangleright}}^{\infty} f(\tilde{y}|y)\,\mathrm{d}\tilde{y} = \gamma/2$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover



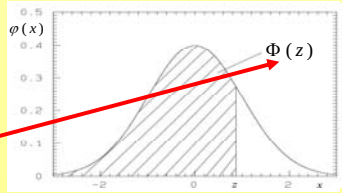
Grenzen des Vertrauensbereichs $y^{\triangleleft}$ und $y^{\triangleright}$

$$y^{\triangleleft} = y - k_p \cdot u(y)$$

mit $p = \kappa \cdot (1 - \gamma/2)$

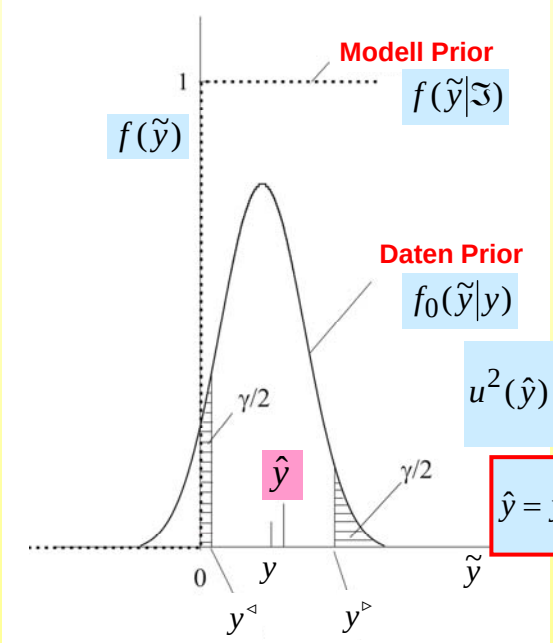
$$y^{\triangleright} = y + k_q \cdot u(y)$$

mit $q = 1 - \kappa \cdot \gamma/2$



$$\kappa = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{y/u(y)} \exp(-z^2/2)dz = \Phi(y/u(y))$$

chel, IRS, Leibniz Universität Hannover



Bester Schätzwert

$\hat{y}$ ***mit*** $u(\hat{y})$

$$\hat{y} = \int_0^\infty \tilde{y} \cdot f(\tilde{y}|y,\Im)\, d\tilde{y}$$

$$u^2(\hat{y}) = \int_0^\infty (\tilde{y} - E\,\tilde{y})^2 \cdot f(\tilde{y}|y,\Im)\, d\tilde{y}$$

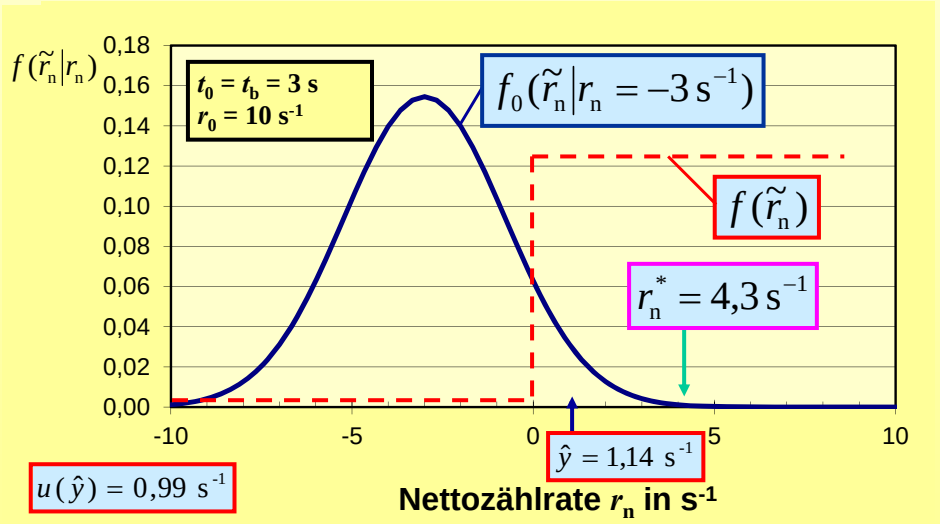
$$\hat{y} = y + \frac{u(y)\cdot \exp\left(-y^2/(2\cdot u^2(y))\right)}{\kappa\sqrt{2\pi}}$$

$$u(\hat{y}) = \sqrt{u^2(y) - (\hat{y} - y)\cdot \hat{y}}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

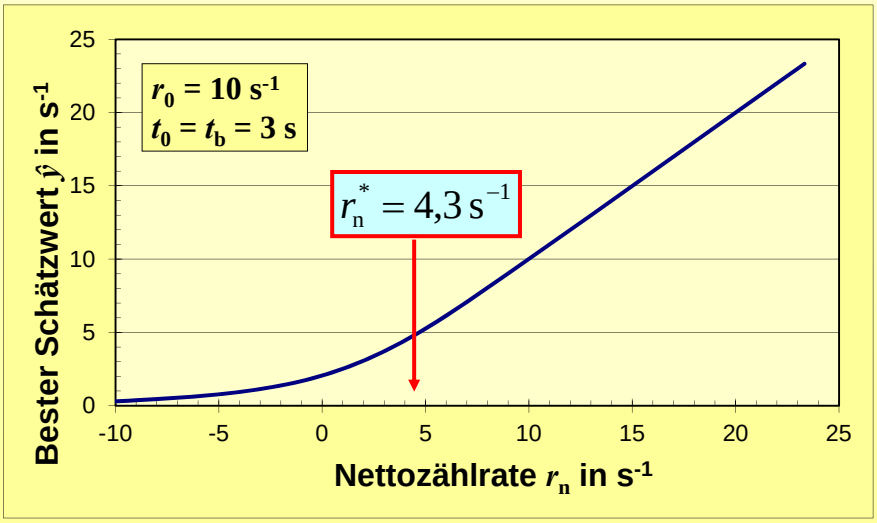
Negatives Messergebnis - positiver bester Schätzwert -

$$f(\tilde{r}_n|r_n) = f_0(\tilde{r}_n|r_n)\cdot f(\tilde{r}_n)$$



R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Bester Schätzwert nach ISO 11929



Nach ISO 11929 wird für $y < y^*$ kein bester Schätzwert berechnet!

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Vorgehensweise

- Ein vorliegendes primäres Messergebnis wird mit der Erkennungsgrenze verglichen.
- Wird ein Probenbeitrag erkannt, ist der Vertrauens- oder Überdeckungsbereich zu berechnen.
- Die Nachweisgrenze wird mit Anforderungen an das Messverfahren aus gesetzlichen oder anderen Quellen (Richtwert) verglichen.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Institut für Radioökologie und Strahlenschutz
Leibniz Universität Hannover

Inhalt

- Stand der Normung
- Einige Grundlagen der Metrologie
- All unser Wissen: PDFs!
- Einige Anmerkungen zur Wahrscheinlichkeit
- Eine Bayes'sche Theorie der Messunsicherheiten
- ISO GUM und GUM Supplement I
- Messunsicherheiten nach dem GUM
- Charakteristische Grenzen nach ISO 11929
- **Einige einfache Beispiele**

Institut für Radioökologie und Strahlenschutz
Leibniz Universität Hannover

Umsetzung der Charakteristischen Grenzen in Normen

Charakteristische Grenzen nach DIN ISO 11929

Umsetzen der Norm in KTA und Messanleitungen

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Explizit behandelte Modelle
Einfache Anwendungen von ISO 11929

Aktivität bei zählenden und spektrometrische Messungen

$$y = (r_g - r_0) \cdot w = r_n \cdot w$$
$$= (n_g / t_g - n_0 / t_0) \cdot w$$

Chemische Analytik

$$y = (x_g - x_0) \cdot w$$

w

Häufig benutzte Modelle

$$y = (x_1 - x_2 x_3 - x_4) \cdot \frac{x_6 x_8 \ldots}{x_5 x_7 \ldots}$$

with $x_1 = r_g$ and $x_2 = r_0$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Allgemeine chemische Analytik

Messergebnis $y = (x_g - x_0) \cdot w$

Unsicherheit $u^2(y) = w^2 \cdot u^2(x_g - x_0) + (x_g - x_0)^2 \cdot u(w)^2$

u-tilde von 0 $\tilde{u}^2(0) = 2 \cdot w^2 \cdot u^2(x_0)$

Erkennungsgrenze $y^* = k_{1-\alpha} \cdot w \cdot \sqrt{2} \cdot u(x_0)$

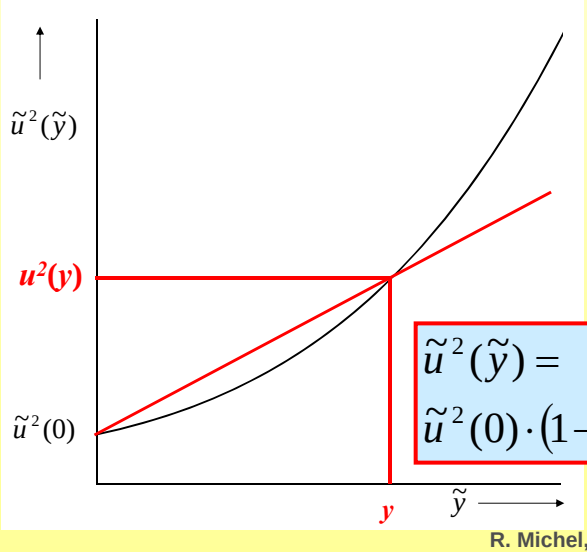
Interpolations-formel $\tilde{u}^2(\tilde{y}) = \tilde{u}^2(0) \cdot (1 - \tilde{y} / y) + u^2(y) \cdot \tilde{y} / y$

Nachweisgrenze $y^\# = a + \sqrt{a^2 + (k_{1-\beta}^2 - k_{1-\alpha}^2) \cdot \tilde{u}^2(0)}$

mit $a = k_{1-\alpha} \cdot \tilde{u}(0) + \frac{1}{2}(k_{1-\beta}^2 / y) \cdot (u^2(y) - \tilde{u}^2(0))$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Berechnung von $\tilde{u}(\tilde{y})$ durch Interpolation



Wenn nur $\tilde{u}(0)$ und ein Messergebnis y und die ihm zugeordnete Messunsicherheit $u(y)$ bekannt sind, kann man eine lineare Interpolation als Näherung benutzen.

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = \tilde{u}^2(0)\cdot\left(1-\tilde{y}/y\right)+u^2(y)\cdot\tilde{y}/y$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Bestimmung der Aktivität

Messergebnis $y = w\cdot(r_g - r_0) = w\cdot(n_g/t_g - n_0/t_0)$

Unsicherheit $u^2(y) = (n_g/t_g + n_0/t_0)^2\cdot u^2(w) + w^2\cdot(n_g/t_g^2 + n_0/t_0^2)$

einsetzen

Für $\tilde{y}$ erwartet man: $n_g = (\frac{\tilde{y}}{w} + \frac{n_0}{t_0})\cdot t_g$ $\quad u^2(n_g) = n_g$

u-tilde von $\tilde{y}$

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = \tilde{y}^2\cdot u_{rel}^2(w) + w^2\cdot\left[\frac{\tilde{y}}{t_g\cdot w} + \frac{n_0}{t_0}\cdot\left(\frac{1}{t_g}+\frac{1}{t_0}\right)\right]$$

$u_{rel}(w) = u(w)/w$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Bestimmung der Aktivität

Messergebnis $y = w \cdot (r_g - r_0) = w \cdot (n_g / t_g - n_0 / t_0)$

Unsicherheit $u^2(y) = r_n^2 \cdot u^2(w) + w^2 \cdot (n_g / t_g^2 + n_0 / t_0^2)$

u-tilde von $\tilde{y}$

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = \tilde{y}^2 \cdot u_{rel}^2(w) + w^2 \cdot \left[\frac{\tilde{y}}{t_g \cdot w} + \frac{n_0}{t_0} \cdot \left(\frac{1}{t_g} + \frac{1}{t_0} \right) \right]$$

$u_{rel}(w) = u(w) / w$

Erkennungsgrenze

$$y^* = k_{1-\alpha} \cdot w \cdot \sqrt{\frac{n_0}{t_0} \cdot \left(\frac{1}{t_g} + \frac{1}{t_0} \right)}$$

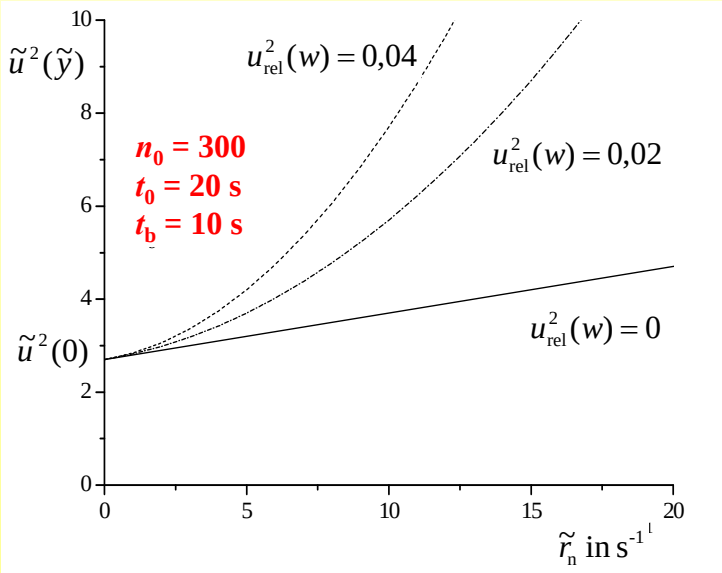
Nachweisgrenze

$$y^\# = y^* + k_{1-\beta} \cdot \sqrt{y^{\#2} \cdot u_{rel}^2(w) + w^2 \cdot \left[\frac{y^\#}{t_g \cdot w} + \frac{n_0}{t_0} \cdot \left(\frac{1}{t_g} + \frac{1}{t_0} \right) \right]}$$

$k_{1-\alpha} = k_{1-\beta} = k$: $y^\# = \dfrac{2 \cdot y^* + (k^2 \cdot w) / t_g}{1 - k^2 \cdot u_{rel}^2(w)}$

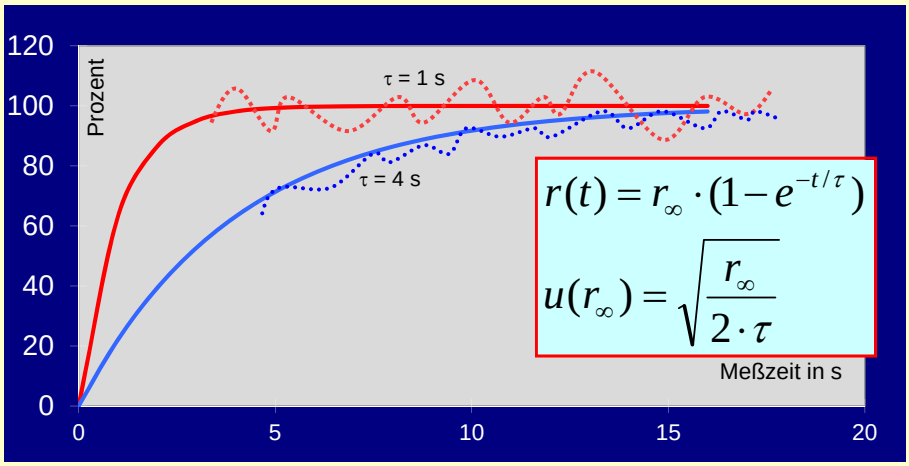
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

$\tilde{u}(\tilde{y})$ und die Unsicherheit der Kalibrierung



R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Ratemeter-Messungen: Abhängigkeit des Messwertes von der Dämpfungszeitkonstanten



$$r(t) = r_\infty \cdot (1 - e^{-t/\tau})$$

$$u(r_\infty) = \sqrt{\frac{r_\infty}{2 \cdot \tau}}$$

Erkennungsgrenze bei Ratemeter-Messungen

$$r(t) = r_\infty \cdot (1 - e^{-t/\tau}) \quad u(r_\infty) = \sqrt{\frac{r_\infty}{2 \cdot \tau}}$$

$$r_\mathrm{n} = r_\mathrm{b} - r_0 \quad \Rightarrow \quad r_\mathrm{n}^* = k_{1-\alpha} \cdot \sqrt{\frac{r_0}{\tau}}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Einstellung von Warnschwellen bei Messungen mit Zeitvorwahl

- **Read your instruction manual before operating !**
- **Wähle die Wahrscheinlichkeiten α und β.**
- **Die Warnschwelle muss oberhalb der Erkennungsgrenze r^* liegen.**

$$r^* = k_{1-\alpha} \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot r_0}{t}}$$

- **Ggfs. Verlängerung der Messdauer.**
- **Die Nachweisgrenze muss, die Warnschwelle sollte so weit wie praktikabel unter dem jeweiligen Radionuklid-abhängigen Grenzwert der Oberflächenkontamination liegen.**

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Ratemeter mit Kalibrierung

$$y = (r_b - r_0) \cdot w$$

$$u^2(y) = w^2 \cdot \left(\frac{r_b}{2\tau_b} + \frac{r_0}{2\tau_0} \right) + (r_b - r_0)^2 \cdot u^2(w)$$

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = w^2 \cdot \left[\frac{\tilde{y}}{2\tau_b \cdot w} + r_0 \cdot \left(\frac{1}{2\tau_b} + \frac{1}{2\tau_0} \right) \right] + \tilde{y}^2 \cdot u_{rel}^2(w)$$

$$u_{rel}(w) = u(w) / w$$

$$y^* = k_{1-\alpha} \cdot w \cdot \sqrt{r_0 \cdot \left(\frac{1}{2\tau_b} + \frac{1}{2\tau_0} \right)}$$

$$y^\# = y^* + k_{1-\beta} \cdot \sqrt{w^2 \cdot \left[\frac{y^\#}{2\tau_b \cdot w} + r_0 \cdot \left(\frac{1}{2\tau_b} + \frac{1}{2\tau_0} \right) \right] + y^{\#2} \cdot u_{rel}^2(w)}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Ein sehr allgemeines Modell I

$$Y = G(X_1,\ldots,X_m) = (X_1 - X_2X_3 - X_4)\cdot\frac{X_6X_8\ldots}{X_5X_7\ldots} = (X_1 - X_2X_3 - X_4)\cdot W$$

mit $X_1 = R_g$ und $X_2 = R_0$

Seien X_1 und X_2 die Bruttozähllrate bzw. die Nettozählrate

$$y = G(x_1,\ldots,x_m) = (x_1 - x_2x_3 - x_4)\cdot\frac{x_6x_8\ldots}{x_5x_7\ldots} = (\frac{n_g}{t_g} - \frac{n_0}{t_0}x_3 - x_4)\cdot w$$

mit $x_1 = n_g/t_g$; $x_2 = n_0/t_0$

und $u^2(x_1) = n_g/t_g^2$; $u^2(x_2) = n_0/t_0^2$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Ein sehr allgemeines Modell II

$$u^2(y) = w^2\cdot(u^2(x_1) + x_3^2u^2(x_2) + x_2^2u^2(x_3) + u^2(x_4)) + y^2u_{\mathrm{rel}}^2(w)$$
$$= w^2\cdot(r_g/t_g + x_3^2r_0/t_0 + r_0^2u^2(x_3) + u^2(x_4)) + y^2u_{\mathrm{rel}}^2(w)$$

mit $u_{\mathrm{rel}}^2(w) = \sum_{i=5}^{m}\frac{u^2(x_i)}{x_i^2}$

Für einen wahren Wert $\tilde{y}$ **erwartet man**

$n_g = (\tilde{y}/w + r_0\cdot x_3 + x_4)/t_g$ **mit** $u^2(n_g) = n_g$

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = w^2\cdot\left((\tilde{y}/w + r_0x_3 + x_4)/t_g + x_3^2r_0/t_0 + r_0^2u^2(x_3) + u^2(x_4)\right) + \tilde{y}^2u_{\mathrm{rel}}^2(w)$$

Quadratische Form in $\tilde{y}$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Ein sehr allgemeines Modell III

Erkennungsgrenze

$$y^* = k_{1-\alpha} \cdot \tilde{u}(0)$$
$$= k_{1-\alpha} \cdot w \cdot \sqrt{(x_3 \cdot n_0 / t_0) / t_g + x_3^2 \cdot n_0 / t_0^2 + u^2(x_3) \cdot n_0^2 / t_0^2 + u^2(x_4)}$$

Nachweisgrenze

$$y^\# = y^* + k_{1-\beta} \cdot \tilde{u}(y^\#) = y^* + k_{1-\beta} \cdot$$
$$\sqrt{w^2 \cdot \left((y^\# / w + x_3 \cdot n_0 / t_0) / t_g + x_3^2 \cdot n_0 / t_0^2 + u^2(x_3) \cdot n_0^2 / t_0^2 + u^2(x_4)\right) + y^{\#^2} \cdot u_{rel}^2(w)}$$

Eine Nachweisgrenze kann berechnet werden, wenn: $k_{1-\beta}^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w) < 1$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

ISO 11929: Wischtest (in a nutshell)

$$a_{\mathrm{s}} = \frac{r_{\mathrm{g}} - r_0}{e_{\mathrm{D}} \cdot s \cdot e_{\mathrm{w}}} = \frac{n_{\mathrm{g}} / t_{\mathrm{g}} - n_0 / t_0}{e_{\mathrm{D}} \cdot s \cdot e_{\mathrm{w}}} = (n_{\mathrm{g}} / t_{\mathrm{g}} - n_0 / t_0) \cdot w$$

$$w = \frac{1}{e_{\mathrm{D}} \cdot s \cdot e_{\mathrm{w}}} \qquad u_{\mathrm{rel}}^2(w) = u_{\mathrm{rel}}^2(e_{\mathrm{D}}) + u_{\mathrm{rel}}^2(s) + u_{\mathrm{rel}}^2(e_{\mathrm{w}})$$

$$u^2(a_{\mathrm{S}}) = w^2 \cdot (r_{\mathrm{g}} / t_{\mathrm{g}} + r_0 / t_0) + a_{\mathrm{S}}^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w)$$

$$n_{\mathrm{g}} = t_{\mathrm{g}} \cdot (\tilde{a}_{\mathrm{S}} / w + r_0)$$

$$\tilde{u}^2(\tilde{a}_{\mathrm{S}}) = w^2 \cdot ((\tilde{a}_{\mathrm{S}} / w + r_0) / t_{\mathrm{g}} + r_0 / t_0) + \tilde{a}_{\mathrm{S}}^2 u_{\mathrm{rel}}^2(w)$$

$$a_{\mathrm{S}}^* = k_{1-\alpha} \cdot \tilde{u}^2(0) = k_{1-\alpha} \cdot \sqrt{w^2 \cdot (r_0 / t_{\mathrm{g}} + r_0 / t_0)}$$

Die Erkennungsgrenze hängt nicht von der Unsicherheit von w ab.

$$a_{\mathrm{S}}^\# = a_{\mathrm{S}}^* + k_{1-\beta} \cdot \tilde{u}^2(\tilde{a}_{\mathrm{S}})$$
$$= a_{\mathrm{S}}^* + k_{1-\beta} \cdot \sqrt{w^2 \cdot ((\tilde{a}_{\mathrm{S}}^\# / w + r_0) / t_{\mathrm{g}} + r_0 / t_0) + \tilde{a}_{\mathrm{S}}^{\#^2} u_{\mathrm{rel}}^2(w)}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Messung der Oberflächenkontamination mit einem Wischtest

$$a_S = \frac{(n_g / t_g - n_0 / t_0)}{e_D \cdot s \cdot e_W} = (r_g - r_0) \cdot w \qquad w = \frac{1}{e_D \cdot s \cdot e_W}$$

Größe	Symbol	Wert	Unsicherheit	Typ	p.d.f.	Einheit
Brutto-Ereignisanzahl	n_g	2591	50,90	A	Poisson	1
Dauer der Brutto-Messung	t_g	360	-	-	-	s
Brutto-Zählrate	r_g	7,197	0,141	A	-	s^{-1}
Nulleffekt-Ereignisanzahl	n_0	41782	204,41	A	Poisson	1
Dauer der Nulleffekt-Messung	t_0	7200	-	-	-	s
Nulleffekt-Zählrate	r_0	5,803	0,0284	A	-	s^{-1}
Netto-Zählrate	r_n	1,394	0,1442	comb.	-	s^{-1}
Detektor Ansprechvermögen	e_D	0,31	0,0155	B	normal	s^{-1} Bq^{-1}
Entnahmefaktor	e_W	0,34	0,16	B	[0,06–0,62]	1
Gewischte Fläche	s	100	10	B	normal	cm^2
Flächenbezogene Aktivität	a_S	0,1323	0,0654	comb.	-	Bq cm^{-2}

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

$\alpha = \beta = \gamma = 0{,}05$

$$w = \frac{1}{e_D \cdot s \cdot e_W}$$

Ergebnisse für den Wischtest

Y	y	$u(y)$	unit	y	$u(y)$	unit
	Typ A & B			nur Typ A		
a_S	0,132	0,065	Bq cm^{-2}	0,132	0,014	Bq cm^{-2}
a_S^*	0,020	-	Bq cm^{-2}	0,020	-	Bq cm^{-2}
$a_S^\#$	0,116	-	Bq cm^{-2}	0,041	-	Bq cm^{-2}
$a_S^\triangleleft$	0,022	-	Bq cm^{-2}	0,106	-	Bq cm^{-2}
$a_S^\triangleright$	0,261	-	Bq cm^{-2}	0,159	-	Bq cm^{-2}
$\hat{a}_S$	0,136	0,062	Bq cm^{-2}	0,132	0,014	Bq cm^{-2}

$$a_S = (r_g - r_0) \cdot \frac{1}{e_D \cdot s \cdot e_W} = \frac{(n_g / t_g - n_0 / t_0)}{e_D \cdot s \cdot e_W} = (r_g - r_0) \cdot w$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Characteristic Limits according to ISO 11929

$$y = (x_1 - x_2 x_3 - x_4) \cdot \frac{x_6 x_8 \ldots}{x_5 x_7 \ldots} = (\frac{n_g}{t_g} - \frac{n_0}{t_0} x_3 - x_4) \cdot w$$

with $x_1 = n_g / t_g$; $x_2 = n_0 / t_0$ and $u^2(x_1) = n_g / t_g^2$; $u^2(x_2) = n_0 / t_0^2$

Wischtest

Preselected parameters		unit	Calculated parameters			
α	0,05	1	$k_{1-\alpha}$	1,6449	κ	0,9954
β	0,05	1	$k_{1-\beta}$	1,6449	$p(\kappa)$	0,9705
γ	0,05	1	$k_{1-\gamma/2}$	1,9600	k_p	1,8878
guideline value	0,5	Bq cm^{-2}	π	3,1416	$q(\kappa)$	0,9751
			$y/u(y)$	2,6014	k_q	1,9620

Evaluation of the measurement and calculation of characteristic limits

$$y = (x_1 - x_2 x_3 - x_4) \cdot \frac{x_6 x_8 \ldots}{x_5 x_7 \ldots} = (\frac{n_g}{t_g} - \frac{n_0}{t_0} x_3 - x_4) \cdot w$$

$$\text{with} \quad x_1 = n_g / t_g \qquad ; x_2 = n_0 / t_0$$

$$\text{and} \quad u^2(x_1) = n_g / t_g^2 \quad ; u^2(x_2) = n_0 / t_0^2$$

upper confidence limit	y>	0,2320	Bq cm-2	-	-	

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Characteristic Limits according to ISO 11929

$$y = (x_1 - x_2 x_3 - x_4) \cdot \frac{x_6 x_8 \ldots}{x_5 x_7 \ldots} = (\frac{n_g}{t_g} - \frac{n_0}{t_0} x_3 - x_4) \cdot w$$

with $x_1 = n_g / t_g$; $x_2 = n_0 / t_0$ and $u^2(x_1) = n_g / t_g^2$; $u^2(x_2) = n_0 / t_0^2$

Allgemeines Modell

Preselected parameters		unit	Calculated parameters			
α	0,05	1	$k_{1-\alpha}$	1,6449	κ	0,9954
β	0,05	1	$k_{1-\beta}$	1,6449	$p(\kappa)$	0,9705
γ	0,05	1	$k_{1-\gamma/2}$	1,9600	k_p	1,8878
guideline value	0,5	Bq cm^{-2}	π	3,1416	$q(\kappa)$	0,9751
			$y/u(y)$	2,6014	k_q	1,9620

Evaluation of the measurement and calculation of characteristic limits

quantity	symbol	x (input)	unit	$u(x)$ (input)	$u_{rel}(x)$	type	C_x	$u(x)*C_x$
gross counts	n_g	2591	1	50,90	0,0196	A	-	-
gross measuring time	t_g	360	s	0,00	0,0000	-	-	-
background counts	n_0	41782	1	204,41	0,0049	A	-	-
backg. measuring time	t_0	7200	s	0,00	0,0000	-	-	-
background modifying factor	x_3	1	1	0,0000	0,0000	B	-0,5506	0,0000
general blank	x_4	0	s^{-1}	0,0000		B	-0,0949	0,0000
calibration factor	w	0,0949	NN	0,0351	0,3702	B	1,3942	0,0490
intermediate results								
gross counting rate	$r_g = x_1$	7,20		0,1414	0,0196		0,0949	0,0134
background counting rate	$r_0 = x_2$	5,80		0,0284	0,0049		0,0949	0,0027
net counting rate	$r_n = x_1 - x_2 x_3 - x_4$	1,39		0,0282	0,0202		-	-

results		value	unit	uncertainty	$u_{rel.}$
result	y	0,1323	Bq cm-2	0,0508	0,3844
best estimate	y^	0,1330	Bq cm-2	0,0499	0,3755
decision threshold	y*	0,0203	Bq cm-2	-	-
detection limit	y#	0,0657	Bq cm-2	-	-
lower confidence limit	y<	0,0363	Bq cm-2	-	-
upper confidence limit	y>	0,2320	Bq cm-2	-	-

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Etwas zu KTA 1503 und DIN 25457

KTA 1503 Überwachung der Ableitung gasförmiger und an Schwebstoffen gebundener radioaktiver Stoffe, Teil 1: Überwachung der Ableitung radioaktiver Stoffe mit der Kaminfortluft bei bestimmungsgemässem Betrieb

DIN 25457Aktivitätsmessverfahren für die Freigabe von radioaktiven Stoffen und kerntechnischen Anlagenteilen — Teil 1: Grundlagen

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

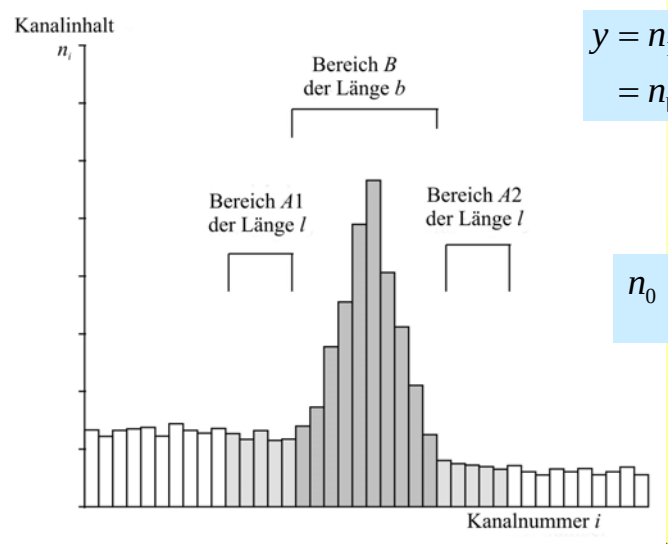
Vorspann

In KTA 1503 „Überwachung der Ableitung gasförmiger und an Schwebstoffen gebundener radioaktiver Stoffe, Teil 1: Überwachung der Ableitung radioaktiver Stoffe mit der Kaminfortluft bei bestimmungsgemässem Betrieb“ wurde bisher zur Auswertung gamma-spektrometrischer Messungen das Trapezverfahren (linearer Untergrundabzug) beschrieben. Darum wird dieses nachfolgend dargestellt. Danach wird kurz ein Verfahren dargestellt, dass das Trapezverfahren auf gekrümmten Untergrund bei schlecht aufgelösten Spektren erweitert.

Die Realität der gamma-spektrometrischen Auswertung sieht allerdings meist anders aus, d.h. es werden Programme benutzt, die die Nettopeaks mittels Entfaltungsverfahren bestimmen. Berechnung der charakteristischen Grenzen nach DIN ISO 11929 bei Anwendung von derartigen Programmen steht – meines Wissens – derzeit noch aus. Die Grundlagen dazu sind in „ K. Weise, R. Michel, Erkennungsgrenze, Nachweisgrenze und Vertrauensbereich in der allgemeinen Kernstrahlungsspektrometrie, Kerntechnik 60 No. 4 (1995) 189 – 196“ beschrieben. Die zitierte Arbeit richtet sich allerdings ausschließlich an Entwickler von derartigen Programmen und ist deshalb zur Darstellung in einem Kurs nicht geeignet.

Zum Schluss werden daher einige einfache Anwendungen von DIN ISO 11929 bei gamma-spektrometrischen Messungen dargestellt, wie die Korrektion von Störungen durch andere Radionuklide und durch das gleiche Radionuklid in einem Untergrundspektrum.

Spektrometrische Messungen: Linearer Untergrundabzug



$$y = n_{\mathrm{NP}} = n_{\mathrm{b}} - c_0 \cdot n_0 = n_{\mathrm{b}} - z_0$$

$$n_{\mathrm{b}} = \sum_B n_i$$

$$n_0 = \sum_{A_1} n_i + \sum_{A_2} n_i$$

$$c_0 = b / 2 \cdot l$$

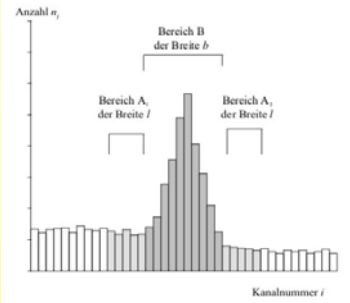
R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Spektrometrische Messungen

$$y = n_{\mathrm{NP}} = n_{\mathrm{b}} - c_0 \cdot n_0 = n_{\mathrm{b}} - z_0$$

$$n_{\mathrm{b}} = \sum_B n_i \qquad n_0 = \sum_{A_1} n_i + \sum_{A_2} n_i \qquad c_0 = b / 2 \cdot l$$

$$u^2(y) = u^2(n_{\mathrm{NP}}) = n_{\mathrm{b}} + c_0^2 \cdot n_0$$



$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = \tilde{u}^2(\tilde{n}_{\mathrm{NP}}) = \tilde{n}_{\mathrm{NP}} + c_0 \cdot n_0 + c_0^2 \cdot n_0$$

$$n_{\mathrm{NP}}^* = k_{1-\alpha} \cdot \sqrt{n_0 \cdot \frac{b}{2 \cdot l} + n_0 \cdot \left(\frac{b}{2 \cdot l}\right)^2}$$

$$n_{\mathrm{NP}}^{\#} = n_{\mathrm{NP}}^* + k_{1-\beta} \cdot \sqrt{n_{\mathrm{NP}}^{\#} + \frac{b}{2 \cdot l} \cdot n_0 + \left(\frac{b}{2 \cdot l}\right)^2 \cdot n_0}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Bestimmung der Aktivität aus einem Spektrum bei linearem Untergrundabzug

$$y = (n_{\mathrm{NP}} / t_{\mathrm{b}}) \cdot w = w \cdot (n_{\mathrm{b}} - z_0) / t_{\mathrm{b}} \qquad n_{\mathrm{NP}} = n_{\mathrm{b}} - z_0$$

$$u^2(n_{\mathrm{NP}}) = n_{\mathrm{b}} + c_0^2 \cdot n_0 \qquad u^2(y) = w^2 \cdot (n_{\mathrm{b}} + c_0^2 \cdot n_0) / t_b^2 + y^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w)$$

Für $\tilde{y}$ erwartet man $n_{\mathrm{b}} = \frac{\tilde{y}}{w} \cdot t_{\mathrm{b}} + z_0$ und erhält mit $u^2(n_{\mathrm{b}}) = n_{\mathrm{b}}$:

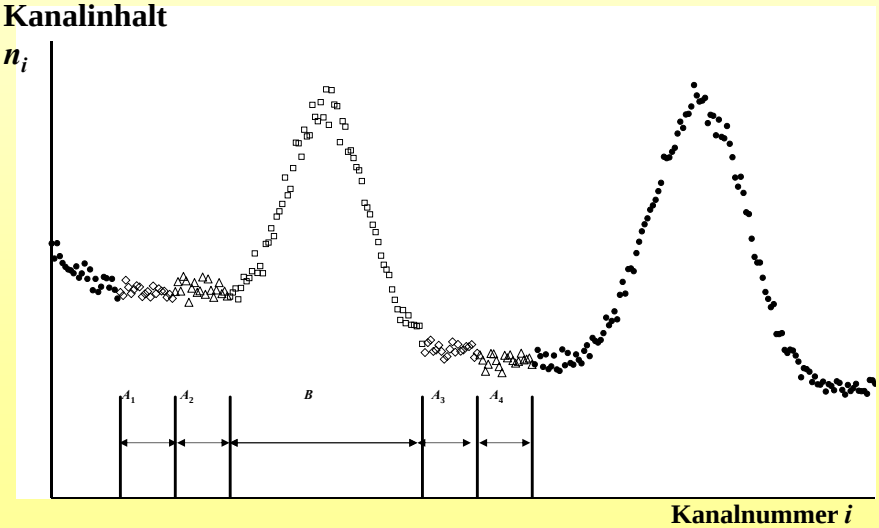
$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = w^2 \cdot (\frac{\tilde{y}}{w} \cdot t_{\mathrm{b}} + c_0 \cdot n_0 + c_0^2 \cdot n_0) / t_b^2 + \tilde{y}^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w)$$

$$y^* = k_{1-\alpha} \cdot w \cdot \sqrt{c_0 \cdot n_0 + c_0^2 \cdot n_0}$$

$$y^{\#} = y^* + k_{1-\beta} \cdot w \sqrt{(\frac{y^{\#}}{w} \cdot t_{\mathrm{b}} + c_0 \cdot n_0 + c_0^2 \cdot n_0) / t_{\mathrm{b}}^2 + y^{\#2} \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w)}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Nettopeakfläche in einem Gamma-Spektrum mit schwach gekrümmtem Untergrund



R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Nettopeakfläche in einem Gamma-Spektrum mit schwach gekrümmtem Untergrund

$$y = n_{\mathrm{NP}} = n_{\mathrm{b}} - z_0$$

$$n_{\mathrm{b}} = \sum_B n_i$$

$$c_0 = \frac{b}{4 \cdot l}$$

$$z_0 = c_0 \cdot n_0 - c_1 \cdot n_0'$$

$$u^2(y) = u^2(n_{\mathrm{NP}}) = n_{\mathrm{b}} + u^2(z_0)$$

$$n_0' = n_1 - n_2 - n_3 + n_4$$

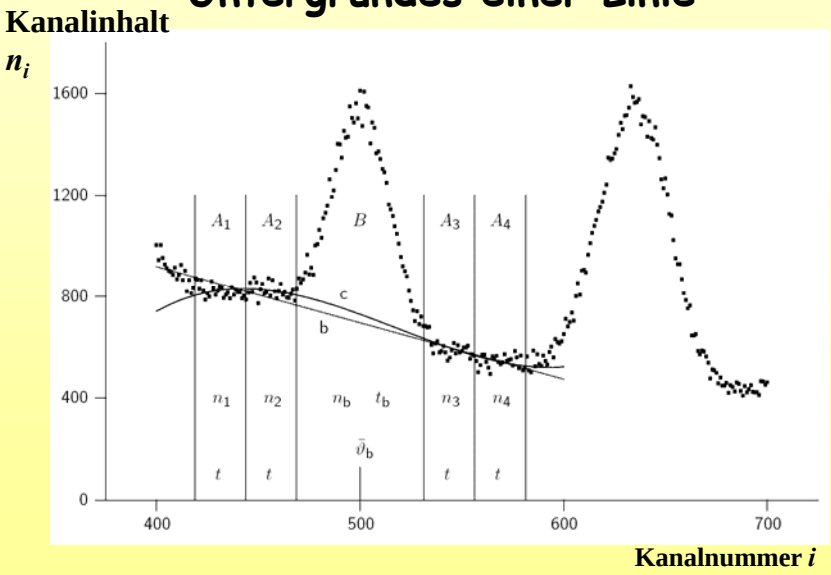
$$n_0 = n_1 + n_2 + n_3 + n_4$$

$$c_1 = c_0 \cdot (4/3 + 4 \cdot c_0 + 8 \cdot c_0^2/3)/(1 + 2 \cdot c_0)$$

$$z_0 = \frac{b}{4 \cdot l}(n_1 + n_2 + n_3 + n_4) - \frac{b}{4 \cdot l} \cdot \left(\frac{4}{3} + \frac{b}{l} + \frac{b^2}{6 \cdot l^2}\right)(n_1 - n_2 - n_3 + n_4) / \left(1 + \frac{b}{2l}\right)$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Kanalbereiche zur Ermittlung des Untergrundes einer Linie



Details siehe DIN ISO 11929

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Wenn ich mir was wünschen dürfte …

… wünschte ich mir von den Programmherstellern folgende Information zu einer Gamma-Linie:

- **die Ereigniszahl im Nettopeak n_{NP} und die ihr zugeordnete Standardunsicherheit $u(n_{NP})$,**
- **die Ereigniszahl im Bruttopeak n_b und**
- **die Ereigniszahl z_0, die als Untergrund abgezogen wurde, und die ihr zugeordnete Standardunsicherheit $u(z_0)$.**

Dann kann man mit der berechtigten Annahme $u^2(n_b) = n_b$ schön weiterrechnen.

Es ist nämlich nicht damit getan, dass man DIN ISO 11929 angewendet hat, um zu entscheiden, ob ein Nettopeak größer Null vorliegt. Man muss weiterrechnen und zum Beispiel nach DIN ISO 11929 prüfen,

- **ob ein erkannter Nettopeak im Probenspektrum im Vergleich zu einem Untergrundspektrum einen Probenbeitrag erkennen lässt oder**
- **ob eine spektroskopische Interferenz eines anderen Radionuklids im Probenspektrum noch einen Beitrag des gesuchten Nuklids in der Probe erkennen lässt.**

Diese beiden Fälle werden nachstehend behandelt.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Der Nettopeak

Liegen bei der Anwendung von Auswerteprogrammen mittels $n_{NP} = n_b - z_0$ nur n_{NP} sowie z_0 und $u(z_0)$ vor, gilt:

$$u^2(n_{NP}) = n_b + u^2(z_0) = n_{NP} + z_0 + u^2(z_0)$$

$$\tilde{u}^2(\tilde{n}_{NP}) = \tilde{n}_{NP} + z_0 + u^2(z_0)$$

$$n^*_{NP} = k_{1-\alpha} \cdot \sqrt{z_0 + u^2(z_0)}$$

$$n^\#_{NP} = n^*_{NP} + k_{1-\beta} \cdot \sqrt{n^\#_{NP} + z_0 + u^2(z_0)}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Spektrometrie und Untergrundabzug

Liegen bei der Anwendung von Auswerteprogrammen mittels $n_{\mathrm{NP}} = n_{\mathrm{b}} - z_0$ nur n_{NP} sowie z_0 und $u(z_0)$ vor, gilt $u^2(n_{\mathrm{NP}}) = n_{\mathrm{b}} + u^2(z_0)$ und man erhält mit dem Modell: $y = (n_{\mathrm{NP}} / t) \cdot w = w \cdot (n_{\mathrm{b}} - z_0) / t$

$$u^2(y) = w^2 \cdot (n_{\mathrm{b}} + u^2(z_0)) / t^2 + y^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w)$$

Für $\tilde{y}$ erwartet man $n_{\mathrm{b}} = \frac{\tilde{y}}{w} \cdot t + z_0$ und erhält:

$$u^2(\tilde{y}) = w^2 \cdot \left(\frac{\tilde{y}}{w} \cdot t + z_0 + u^2(z_0) \right) / t^2 + \tilde{y}^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w)$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Spektrometrie und Untergrundabzug

Mit $u^2(\tilde{y}) = w^2 \cdot \left(\frac{\tilde{y}}{w} \cdot t + z_0 + u^2(z_0) \right) / t^2 + \tilde{y}^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w)$

berechnet man die

Erkennungsgrenze $y^* = k_{1-\alpha} \cdot w \cdot \sqrt{\left(z_0 + u^2(z_0)\right) / t^2}$

und die Nachweisgrenze

$$y^{\#} = y^* + k_{1-\beta} \cdot \sqrt{w^2 \cdot \left(\frac{y^{\#}}{w} \cdot t + z_0 + u^2(z_0) \right) / t^2 + y^{\#2} \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w)}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Korrektion der Störung einer Linie im Probenspektrum (Index b) durch die gleiche Linie in einem separat gemessenen Untergrundspektrum (Index 0)

Es seien bekannt: $n_{\mathrm{NP,b}}$, $n_{\mathrm{NP,0}}$, $u(n_{\mathrm{NP,b}})$, $u(n_{\mathrm{NP,0}})$ **sowie** $z_{0,\mathrm{b}}$ **und** $u(z_{0,\mathrm{b}})$.

Es gilt: $n_{\mathrm{NP,b}} = n_{\mathrm{b,b}} - z_{0,\mathrm{b}}$ **und** $u^2(n_{\mathrm{b,b}}) = n_{\mathrm{b,b}}$

$$y = (r_{\mathrm{b}} - r_0)\cdot w = (n_{\mathrm{NP,b}} / t_{\mathrm{b}} - n_{\mathrm{NP,0}} / t_0)\cdot w = ((n_{\mathrm{b,b}} - z_{0,\mathrm{b}}) / t_{\mathrm{b}} - n_{\mathrm{NP,0}} / t_0)\cdot w$$

$$\begin{aligned} u^2(y) &= w^2 \cdot \left(u^2(n_{\mathrm{NP,b}})/t_{\mathrm{b}}^2 + u^2(n_{\mathrm{NP,0}})/t_0^2\right) + y^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w) \\ &= w^2 \cdot \left((n_{b,b} + u^2(z_{0,\mathrm{b}}))/t_{\mathrm{b}}^2 + u^2(n_{\mathrm{NP,0}})/t_0^2\right) + y^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w) \end{aligned}$$

Für $\tilde{y}$ **erwartet man** $n_{\mathrm{b,b}} = \left(\frac{\tilde{y}}{w} + n_{\mathrm{NP,0}} / t_0\right)\cdot t_{\mathrm{b}} + z_{0,\mathrm{b}} = \frac{\tilde{y}}{w}\cdot t_{\mathrm{b}} + n_{\mathrm{NP,0}} \cdot \frac{t_{\mathrm{b}}}{t_0} + z_{0,\mathrm{b}}$

und erhält:

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = w^2 \cdot \left((\frac{\tilde{y}}{w}\cdot t_{\mathrm{b}} + n_{\mathrm{NP,0}} \cdot \frac{t_{\mathrm{b}}}{t_0} + z_{0,\mathrm{b}} + u^2(z_{0,\mathrm{b}})) / t_{\mathrm{b}}^2 + u^2(n_{\mathrm{NP,0}})/t_0^2 \right) + \tilde{y}^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w)$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Korrektion einer spektrometrischen Störung einer Linie (Index b) durch eine andere Linie (Index 0) des störenden Nuklids im selben Spektrum I

Es seien bekannt: $n_{\mathrm{NP,b}}$, $n_{\mathrm{NP,0}}$, $u(n_{\mathrm{NP,b}})$, $u(n_{\mathrm{NP,0}})$ **sowie** $z_{0,\mathrm{b}}$ **und** $u(z_{0,\mathrm{b}})$.

Es gilt: $n_{\mathrm{NP,b}} = n_{\mathrm{b,b}} - z_{0,\mathrm{b}}$ $\quad u^2(n_{\mathrm{b,b}}) = n_{\mathrm{b,b}}$

Die Korrektion erfolgt über das Modell:

$$y = (r_{\mathrm{b}} - r_0 \cdot x_3)\cdot w = (n_{\mathrm{b,b}} - z_{0,\mathrm{b}} - x_3 \cdot n_{\mathrm{NP,0}})\cdot w / t$$

$$x_3 = \frac{i_{\mathrm{b}}}{i_0}\frac{e_{\mathrm{b}}}{e_0}$$

Die i_{b}, i_0, e_{b}, e_0 sind die Intensitäten und Ansprechvermögen der mit Indices b und 0 bezeichneten Linien. $u(x_3)$ ist nach GUM zu ermitteln.

$$\begin{aligned} u^2(y) &= \frac{w^2}{t^2}\cdot(u^2(n_{\mathrm{NP,b}}) + x_3^2 \cdot u^2(n_{\mathrm{NP,0}}) + n_{\mathrm{NP,0}}^2 \cdot u^2(x_3)) + y^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w) \\ &= \frac{w^2}{t^2}\cdot(n_{\mathrm{b,b}} + z_{0,\mathrm{b}} + u^2(z_{0,\mathrm{b}}) + x_3^2 \cdot u^2(n_{\mathrm{NP,0}}) + n_{\mathrm{NP,0}}^2 \cdot u^2(x_3)) + y^2 \cdot u_{\mathrm{rel}}^2(w) \end{aligned}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Korrektion einer spektrometrischen Störung einer Linie (Index b) durch eine andere Linie (Index 0) des störenden Nuklids im selben Spektrum II

Modell: $y = (r_b - r_0 \cdot x_3) \cdot w = (n_{b,b} - z_{0,b} - x_3 \cdot n_{NP,0}) \cdot w / t$

Für $\tilde{y}$ erwartet man $n_{b,b} = \left(\frac{\tilde{y}}{w} \cdot t + z_{0,b} + x_3 \cdot n_{NP,0} / t_0 \right)$ und erhält:

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = w^2 \cdot \left((\tilde{y} / w + x_3 \cdot n_{NP,b}) / t + x_3^2 \cdot n_{NP,b} / t_b^2 + u^2(x_3) \cdot n_{NP,b}^2 / t_b^2 \right) + \tilde{y}^2 \cdot u_{rel}^2(w)$$

$$y^* = k_{1-\alpha} \cdot w \cdot \sqrt{\left(x_3 \cdot n_{NP,b} / t + x_3^2 \cdot n_{NP,b} / t_b^2 + u^2(x_3) \cdot n_{NP,b}^2 / t_b^2 \right)}$$

$$y^\# = y^* + k_{1-\beta} \cdot \sqrt{\left(w^2 \cdot (\tilde{y} / w + x_3 \cdot n_{NP,b}) / t + x_3^2 \cdot n_{NP,b} / t_b^2 + u^2(x_3) \cdot n_{NP,b}^2 / t_b^2 \right) + \tilde{y}^2 \cdot u_{rel}^2(w)}$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Das Problem: dominierende Typ B Unsicherheiten

Ein Ausweg:

- Festlegung konservativer Kalibrierfaktoren ohne Unsicherheit mit Zustimmung der Aufsichtsbehörde und der Gutachter
- Qualitätssicherung der Messeinrichtungen und -verfahren streng nach GUM und ISO 11929
- Anwendung von Monte Carlo Methoden nach GUM Supplement I

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Keine Statistik macht aus lausigen Daten gute Ergebnisse.

Wenn man mehr wissen möchte, muss man besser messen.

Aufstellen des Modells der Auswertung:
$y = G(x_i, i = 1,\ldots,n)$

Ermittlung der Unsicherheiten aller Eingangsgrößen

Auswertung der Messung und Ermittlung der Standardunsicherheit des Messergebnisses nach dem GUM oder GUM Supplement 1

Festlegung der Wahrscheinlichkeiten α, β und γ; z.B. α = β = γ = 0,05.

Aufstellung der Funktion $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ **entweder explizit als Gleichung oder mittels Interpolationsformel.**

Erkennungsgrenze $y^* = k_{1-\alpha} \cdot \tilde{u}(0)$

Nachweisgrenze $y^{\#} = y^* + k_{1-\beta} \cdot \tilde{u}(y^{\#})$

GUM

Flussdiagramm

Auswertung und Bestimmung der charakteristischen Grenzen

DIN ISO 11929

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Auswertung und Grenzen des Vertrauens- oder Überdeckungsbereichs

Grenzen des Vertrauens- oder Überdeckungsbereichs können unabhängig davon, ob man nach DIN ISO 11929 einen Probenbeitrag erkannt hat, auf der Grundlage des GUM mit y und $u(y)$ immer angegeben werden.

In Deutschland sagt, das Regelwerk jedoch, dass nur bei erkanntem Probenbeitrag die Grenzen des Vertrauens- oder Überdeckungsbereichs zu berechnen sind.

Die Grenzen des Vertrauens- oder Überdeckungsbereiches

$$y^{\triangleleft} = y - k_p \cdot u(y) \text{ mit } p = \kappa \cdot (1 - \gamma / 2)$$

$$y^{\triangleright} = y + k_q \cdot u(y) \text{ mit } q = 1 - \kappa \cdot \gamma / 2$$

mit

$$\kappa = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{y/u(y)} \exp(-z^2/2)dz = \Phi(y/u(y))$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Bewertung und Dokumentation

Die Nachweisgrenze $y^{\#}$ ist mit dem Richtwert R zu vergleichen.

Wenn $y^{\#} > R$ ist, ist dass Messverfahren für den Messzweck *nicht* geeignet.
Wenn $y^{\#} < R$ ist, ist dass Messverfahren für den Messzweck geeignet.

Das Messergebnis y ist mit der Erkennungsgrenze y^* zu vergleichen.

Ein Beitrag der Probe gilt als erkannt, wenn $y > y^*$.

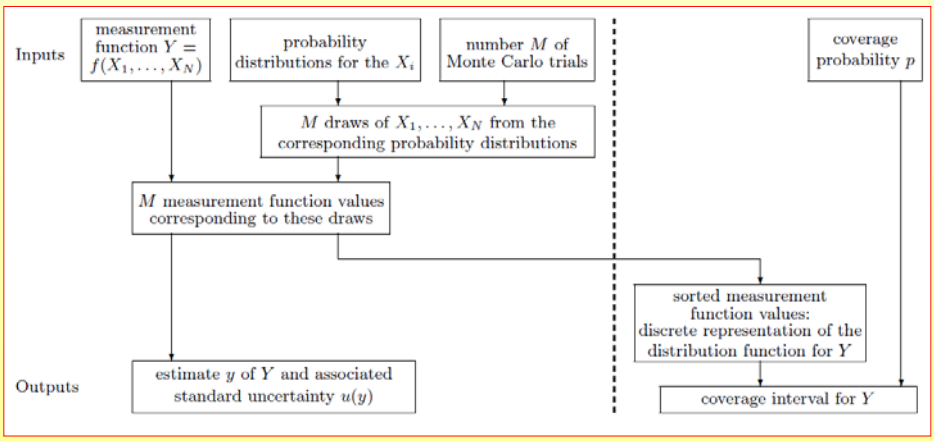
Wenn $y > y^*$ ist, kann der beste Schätzwert und die ihm zugeordnete Standardunsicherheit berechnet werden.

Die vollständige Dokumentation enthält Angaben über

Das vollständige Messergebnis	y und $u(y)$
Die Wahrscheinlichkeiten	α, β und γ
Die Erkennungsgrenze	y^*
Die Nachweisgrenze	$y^{\#}$
Die Grenzen des Vertrauens- oder Überdeckungsbereiches	$y^{\triangleleft}$ und $y^{\triangleright}$
Ggfs. den besten Schätzwert und die ihm zugeordnete Standardunsicherheit	$\hat{y}$ und $u(\hat{y})$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Behandlung von Messunsicherheiten mittels Monte Carlo Methoden



JCGM 104 2009

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Markov formula

The PDF of an output quantity Y is derived by the Markov formula:

$$f_Y(\tilde{y}) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{\mathbf{X}}(\tilde{x}_1,\ldots,\tilde{x}_n)\cdot\delta(\tilde{y}-G(\tilde{x}_1,\ldots,\tilde{x}_n))\,\mathrm{d}\tilde{x}_1\ldots\mathrm{d}\tilde{x}_n$$

The expectation y and the variance $u^2(y)$ can be computed from the Markov formula by integration over $\tilde{y}$

$$y = \mathrm{E}(\tilde{y}) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{\mathbf{X}}(\tilde{x}_1,\ldots,\tilde{x}_n)\cdot G(\tilde{x}_1,\ldots,\tilde{x}_n)\,\mathrm{d}\tilde{x}_1\ldots\mathrm{d}\tilde{x}_n$$

$$u^2(y) = \mathrm{Var}(\tilde{y}) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{\mathbf{X}}(\tilde{x}_1,\ldots,\tilde{x}_n)\cdot(G(\tilde{x}_1,\ldots,\tilde{x}_n)-y)^2\,\mathrm{d}\tilde{x}_1\ldots\mathrm{d}\tilde{x}_n$$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Monte Carlo Approach I

Model: $\mathbf{Y} = G(\mathbf{X})$

$\Im : \mathbf{x}, \mathbf{U}_\mathbf{x}$; prior information about Y, e.g. $\Im_{\text{prior}} : \mathbf{Y} > 0$

$\rightarrow$ PDF $f(\mathbf{x})$: $\mathbf{U}_\mathbf{x} = \text{Cov}(\mathbf{X})$ $\mathbf{x} = \text{E}(\mathbf{X})$ without prior information

We calculate the PDF $f_\mathbf{Y}(\mathbf{Y}|\mathbf{X}) = C \cdot \int f_\mathbf{X}(\mathbf{X}) \cdot \delta(Y - G(\mathbf{X}))\, \text{d}\mathbf{X}$

$\mathbf{y} = \text{E}(\mathbf{Y})$ and $u^2(\mathbf{y}) = \text{Cov}(\mathbf{Y})$ with $f(\mathbf{Y}|\mathbf{X})$

Using the PDF $f(\mathbf{Y}|\mathbf{X}, \Im_{\text{prior}}) = C \cdot f(\mathbf{Y}|\Im_{\text{prior}}) \cdot f(\mathbf{Y}|\mathbf{X})$

$\hat{\mathbf{y}} = \text{E}(\mathbf{Y})$ and $u^2(\hat{\mathbf{y}}) = \text{Cov}(\mathbf{Y})$ with $f(\mathbf{Y}|\mathbf{X}, \Im_{\text{prior}})$

Coverage interval $\mathbf{B} : \int_\mathbf{B} f(\mathbf{Y}|\mathbf{X}, \Im_{\text{prior}})\, \text{d}\mathbf{Y} = 1 - \gamma$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Monte Carlo Approach II

Model: $Y = G(\mathbf{X})$

$\Im : \mathbf{x}, \mathbf{U}_\mathbf{x}$; prior information about Y, e.g. $\Im_{\text{prior}} : Y > 0$

$f_Y(Y|\mathbf{X}) = C \cdot \int f_\mathbf{X}(\mathbf{X}) \cdot \delta(Y - G(\mathbf{X}))\, \text{d}\mathbf{X}$

Decision threshold y^*: $P(y > y^* | \tilde{y} = 0) = \alpha$ with $f(Y|\mathbf{X}, \tilde{y} = 0)$

Detection limit $y^\#$: $P(y < y^* | \tilde{y} = y^\#) = \beta$ with $f(Y|\mathbf{X}, \tilde{y} = y^\#)$

$f(Y|\mathbf{X}, \Im_{\text{prior}}) = C \cdot f(Y|\Im_{\text{prior}}) \cdot f(Y|\mathbf{X})$

Coverage interval $B : \int_B f(Y|\mathbf{X}, \Im_{\text{prior}})\, \text{d}Y = 1 - \gamma$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Monte Carlo Approach III

Model: $Y = G(\mathbf{X})$

$\Im : \mathbf{x}, \mathbf{U}_{\mathbf{x}}$; prior information about Y, e.g. $\Im_{\text{prior}} : Y > 0$

With the PDF $f_Y(Y|\mathbf{X}) = C \cdot \int f_{\mathbf{X}}(\mathbf{X}) \cdot \delta(Y - G(\mathbf{X}))\, \mathrm{d}\mathbf{X}$

one obtains the result and its uncertainty via

$y = \mathrm{E}(Y)$ and $u^2(y) = \mathrm{Var}(Y)$ with $f(Y|\mathbf{X})$

with the PDF $f(Y|\mathbf{X}, \Im_{\text{prior}}) = C \cdot f(Y|\Im_{\text{prior}}) \cdot f(Y|\mathbf{X})$

one obtains the result and its uncertainty via

$\hat{y} = \mathrm{E}(Y)$ and $u^2(\hat{y}) = \mathrm{Var}(Y)$ with $f(Y|\mathbf{X}, \Im_{\text{prior}})$

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Schlussfolgerung

- Mit dem **GUM** liegt ein international akzeptiertes, standardisiertes Verfahren zur Bestimmung von Messunsicherheiten vor.
- Mit Standardmessunsicherheiten können nach **DIN ISO 11929** bzw. nach **ISO 11929** charakteristische Grenzen für alle Messverfahren angegeben werden.
- Standardisierte Messunsicherheiten und charakteristische Grenzen sind eine ***conditio sine qua non*** der Qualitätssicherung.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Bayes Theorie der Messunsicherheiten und charakteristische Grenzen

K. Weise, W. Wöger, Eine Bayessche Theorie der Messunsicherheit, PTB-Bericht N-11, 1992.

K. Weise, W. Wöger, A Bayesian theory of measurement uncertainty. Meas. Sci. Technol. 4, 1-11 (1993).

K. Weise, W. Wöger, Messunsicherheiten und Messdatenauswertung, Wiley-VCH, Weinheim (1999).

K. Weise, Bayesian-statistical detection limit, decision threshold, and confidence interval in nuclear radiation measurement, Kerntechnik 63 (1997) 214 – 224.

R. Michel, Quality Assurance of Nuclear Analytical Techniques Based on Bayesian Characteristic Limits, Proceedings MTAA-10, J. Radioanal. Chem. 245 (2000) 137 – 144.

K. Weise, R. Michel, Erkennungsgrenze, Nachweisgrenze und Vertrauensbereich in der allgemeinen Kernstrahlungsspektrometrie, Kerntechnik 60 No. 4 (1995) 189 - 196

K. Weise, K. Hübel, R. Michel, E. Rose, M. Schläger, D. Schrammel, M. Täschner, Nachweisgrenzen und Erkennungsgrenzen bei Kernstrahlungsmessungen: Spezielle Anwendungen, ISSN 1013-4506, ISBN 3-8249-0904-9, FS-04-127-AKSIGMA, TÜV Verlag Rheinland (2004).

K. Weise, The Bayesian count rate probability distribution in measurement of ionizing radiation by use of a ratemeter, PTB Ra-44 (2004).

K. Weise, K. Hübel, R. Michel, E. Rose, M. Schläger, D. Schrammel, M. Täschner, Determination of the detection limit and decision threshold for ionizing-radiation measurements: fundamentals and particular applications, ISSN 1013-4506, ISBN 3-8249-0945-6, FS-05-129-AKSIGMA, TÜV Verlag Rheinland, Köln (2005).

K. Weise, G. Kanisch, R. Michel, M. Schläger, D. Schrammel, M. Täschner, Bayesian decision threshold, detection limit and confidence limits in ionizing radiation measurements, Radiation Protection Dosimetry 121(1) (2006) 52 – 63.

K. Weise, G. Kanisch, R. Michel, M. Schläger, D. Schrammel, M. Täschner, Monte Carlo determination of the characteristic limits in measurement of ionising radiation: Fundamentals and numerics, Radiation Protection Dosimetry 135 No. 3 (2009) 169 – 196; doi:10.1093/rpd/ncp105

K. Weise, G. Kanisch, R. Michel, M. Schläger, D. Schrammel, M. Täschner, Characteristics values in measurement of ionizing radiation – material for a critical discussion on fundamentals and alternatives, FS-2013-167-AKSIGMA, Verlag TÜV Rheinland, 2013

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover

Literatur zur Bayes Statistik

Th. Bayes, Essay Towards Solving a Problem in the Doctrine of Chances, The Philosophical Transactions (1763), 53, 370-418, reprinted G.A. Barnard; Thomas Bayes, Biometrika 45, No.3/4. (Dec. 1958) 293 - 315.

E.T. Jaynes, Probability Theory: The Logic of Science, © 1995, Edwin T. Jaynes, http://omega.albany.edu:8008/JaynesBook.html (14.01.2007) or http://bayes.wustl.edu/etj/prob/book.pdf (14.01.2007).

E.T. Jaynes, Papers on Probability, Statistics and Statistical Physics, R.D. Rosenkrantz (ed.) Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, reprinted 1989.

J.M. Bernardo, Bayesian Statistics, in: Probability and Statistics (R. Viertl, ed.) Encyclopedia of Life Support Systems (EOLSS). Oxford, UK: UNESCO, 2003.

P. C. Gregory, Bayesian Logical Data Analysis for the Physical Sciences, Cambridge University Press, 2005.

R. Michel, IRS, Leibniz Universität Hannover