

UncertRadio: Calculation of uncertainty budget and detection limits - DWD-LSC-3kanal-V2-fd_DE.txp

Verfahren **Gleichungen** **Werte, Unsicherheiten** **Unsicherheitsbudget** **Resultate** **Text Editor**

Hier kann eine kurze Beschreibung des Verfahrens erfolgen:

Sr-89/Sr-90-Bestimmung mittels LSC in drei Energierregionen A, B und C inklusive Bestimmung der Wiederfindungsrate mittels Sr-85 (DWD)

Quelle: Abschlussbericht der Sr-Arbeitsgruppe des AKU, Anhang A 3-3, Seite 160 bis 178

Anders als in der Vorlage aus dem AKU-Bericht wird hier die Methode der linearen Entfaltung (Linear LSQ fitting) für die Bestimmung der drei Komponenten, Sr-89, Sr-90 und Sr-85, verwendet. Das Rechenbeispiel stammt von Dr. Frenzel, der die im AKU-Bericht beschriebene Methode für den DWD realisiert hat, ist aber leider nicht dasjenige Beispiel, dessen Ergebnisse auf S. 198-200 wiedergegeben sind.

Die lineare Entfaltung wird wie folgt angesetzt:

```

Messkanal A: Nettozählrate_A(t) = Fitp1 * X1(t) + Fitp2 * X2(t) + Fitp3 * X3(t)
Messkanal B: Nettozählrate_B(t) = Fitp1 * X4(t) + Fitp2 * X5(t) + Fitp3 * X6(t)
Messkanal C: Nettozählrate_C(t) = Fitp1 * X7(t) + Fitp2 * X8(t) + Fitp3 * X9(t)

```

Aus der linearen Entfaltung erhält man die Aktivitäten (Bq) von Sr-89, Sr-90 und Sr-85 als Fitparameter Fitp1, Fitp2 und Fitp3, zusammen mit ihrer Kovarianzmatrix (hier dargestellt durch drei Korrelationswerte). Zur Berechnung der Aktivitätskonzentrationen wird direkt auf diese drei Parameter zurückgegriffen, so dass, wenn zwei davon für dieselbe Größe benutzt werden, deren Kovarianz mit berücksichtigt wird.

In dieser Variante wurde das Bezugsdatum für Fitp1, Fitp2 und Fitp3 vom Start der 1. Messung auf den Zeitpunkt der Abtrennung verlegt. Diese Änderung hat zur Folge, dass sich die Formeln für X2(t), X5(t) und X8(t) erheblich vereinfacht haben.

In diesem Beispiel wird die Abklingfunktion fd() verwendet, wodurch die Ausdrücke der Abklingfaktoren X1(t) bis X9(t) deutlich kürzer werden.

Projekt: D:\GF_Proj\UR2\... Beschreibung als Text eingeben, dann: TAB Gleichung

Datei-Selektion

enthält RecentManager („Zuletzt verwendet“)

Startfenster

TAB Verfahren

Textfeld zur Aufnahme von Notizen/Beschreibungen des in diesem Projekt verwendeten Verfahrens

Dieses Beispiel bezieht sich auf ein Verfahren, das lineare Entfaltung (weighted linear LSQ) zur simultanen Bestimmung von Sr-90, Sr-89 und Sr-85, 10mal in drei Energiefenstern eines LSC

Options

Selektion:

Quantile
 Fehlerwahrscheinlichkeiten

Quantile		Fehlerwahrscheinlichkeiten	
k-alpha	1,6448540	alpha	0,04999996
k-beta	1,6448540	beta	0,04999996

Laden der Werte

Probability for confidence interval (1-gamma) 0,950
Coveragefaktor 1,0
Nachweisgrenzenmethode ISO 11929:2010, iterativ
Gamma-Verteilung: Wert von GamDistAdd(0; 0,5, 1) 1,0
Sprache: Deutsch
Listen-Separator(CSV-Dateien): ;
 Anwenden Abbrechen Hilfe

Optionen
 (unter Menü Optionen)

UncertRadio: Calculation of uncertainty budget and detection limits - DWD-LSC-3kanal-V2-fd_DE.txp

Datei Bearbeiten Optionen Hilfe

Verfahren Gleichungen Werte, Unsicherheiten Unsicherheitsbudget Resultate Text Editor

Zeilenweise Eingabe der Gleichungen; die erste Gleichung definiert die Ergebnisgröße; die darin enthaltenen Größen werden mit nachfolgenden Hilfsgleichungen erklärt.

Gleichungen:

```

cSr89 = Fitp1 / (etaSr*mass) * exp(lamSr89 * (tBS - tAS))
cSr90 = Fitp2 / (etaSr*mass) * exp(lamSr90 * (tBS - tAS))
ASr85 = Fitp3 * 1.
etaSr = Fitp3 * EXP(lamSr85*(tCS - tAS)) / ((mass * 1000.) * cSr85V)
rd = Linfit(1, Rbl, eSr85A, eSr85B, eSr85C, eSr90A, eSr90B, eSr90C, eSr89A, eSr89B, eSr89C, &
eY90A, eY90B, eY90C, lamSr85, lamSr90, lamSr89, lamY90, tmess, tstart )

```

Laden Symbole(1) aus Gleichungen **Ergänze nachfolgend Einheiten und Bedeutungen** **Hilfe**

Tabelle der Symbole:

n	Symbol	Typ	Einheit	Bedeutung
1	cSr89	a	Bq/kg	Sr-89-Aktivitätskonzentration, bezogen auf Probenahmezeitpunkt
2	cSr90	a	Bq/kg	Sr-90-Aktivitätskonzentration, bezogen auf Probenahmezeitpunkt
3	ASr85	a	Bq	Sr-85-Aktivität
4	etaSr	a		chemische Sr-Ausbeute
5	rd	a		dummy-Variable zum Aufrufen von Linfit, wird selbts nicht verwendet
6	mass	u	kg	Probenmasse
7	lamSr89	u	1/s	Sr-89-Zerfallskonstante

Laden Symbole(2) aus der ergänzten Symoltabelle **Aktive Ergebnisgröße: cSr89**

Selektion Netto- und Brutto-Zählraten-Symbole: **Netto-Zählrate:** rd **Brutto-Zählrate:** rd **Alles übernehmen**

Projekt: D:\GF_Proj\UR2\ DWD-LSC-3kanal-V2-fd_DE.... **Gleichungen eingeben, dann Button "Symbole aus ...**

TAB Gleichungen

1. Aufnahme der Gleichungen
2. Laden der Symolliste
3. Erläuterung der Symbole
4. Erneutes Laden der ggf. ergänzten Symolliste
5. Selektion der Symbole von Netto- und Bruttozählrate

Modell der Abklingkurve:

Lineares Modell: $Y(t) = a1*X1(t) + a2*X2(t) + a3*X3(t)$

a1--> Fitp1; a2--> Fitp2; a3--> Fitp3

Welche Terme fitten:
Fixieren: Fitp(i) in "Werte, Unsicherheiten" festlegen!

fitten a1*X1(t): erste Komponente
fitten a2*X2(t): zweite Komponente
fitten a3*X3(t): dritte Komponente

3 Anzahl der Zählkanäle (A, B, C)

Neyman Chi Quadrat NLSQ
 Pearson Chi Quadrat PLSQ
 Poisson Maximum Likelihood Estimation PMLE
 Total least-squares TLSQ

gewichteten Fit anwenden
 Kovarianzen zw. Nettozählraten verwenden
 $X_j(t)$ für jede Messung explizit vorgeben?

Definition der Funktionen X_1 bis X_n ($n=3*nchs$): Reihenfolge: wie SQL: 'ORDER BY Mess-Kanal, Messung, Term-Nr.'

Gleichungen der Form $X_i = a_i * i\text{-te Funktion } X_i(t)$:

```

X1 = eSr89A * fd(tAS+tstart,tmess,lamSr89)
X2 = eSr90A * fd(tAS+tstart,tmess,lamSr90) + &
      eY90A * lamY90/(lamY90-lamSr90) * (fd(tAS+tstart,tmess,lamSr90) - fd(tAS+tstart,tmess,lamY90) )
X3 = eSr85A * fd(tAS+tstart,tmess,lamSr85)
X4 = eSr89B * fd(tAS+tstart,tmess,lamSr89)
X5 = eSr90B * fd(tAS+tstart,tmess,lamSr90) + &
      eY90B * lamY90/(lamY90-lamSr90) * (fd(tAS+tstart,tmess,lamSr90) - fd(tAS+tstart,tmess,lamY90) )
X6 = eSr85B * fd(tAS+tstart,tmess,lamSr85)
X7 = eSr89C * fd(tAS+tstart,tmess,lamSr89)
X8 = eSr90C * lamY90/(lamY90-lamSr90) * (fd(tAS+tstart,tmess,lamSr90) - fd(tAS+tstart,tmess,lamY90) )
X9 = eSr85C * fd(tAS+tstart,tmess,lamSr85)

```

OK **Abbrechen**

Definition von Details des Modells der LSQ-Analyse einer komplexen Zerfallskurve

Definition von Zerfallskorrekturen für jedes Nuklid und jedes Energiefenster

Anzahl Gleichungen: (3 x Anz. Zählkanäle)

TAB Werte, Unsicherheiten

Gemessene Werte und beigeordnete; letztere
können auch durch eine Halbbreite einer Rechteck- oder Dreiecksverteilung charakterisiert werden

weiße Zellen: Userinput
farbige Zellen: UR2 Output

A priori bekannte Kovarianzen oder Korrelationen können hier eingegeben werden

Tabelle für die Details einer Kurve von Zählraten;

weiß gefärbte Zellen dienen der Eingabe (auch per Kopieren-Einfügen aus Excel-Spaltenblöcken);

rotlich gefärbte Zellen werden mit dem Button unter der Tabelle berechnet

UncertRadio: Calculation of uncertainty budget and detection limits - DWD-LSC-3kanal-V2-fd_DE.txp

Datei Bearbeiten Optionen Hilfe

Verfahren Gleichungen **Werte, Unsicherheiten** Unsicherheitsbudget Resultate Text Editor

Textzelle für das Editieren einer längeren Formel

Tabelle der Werte, Unsicherheiten:

n	Symbol	Typ	Einheit	Wert	Verteilg	StdAbwFormel	StdAbwWert	Halbbreite	abs/rel	abs.Std.Uns.
1	cSr89	a	Bq/kg	10898.6601	Normal				abs	1734.8436892
2	cSr90	a	Bq/kg	1005.06572	Normal				abs	20.006713354
3	ASr85	a	Bq	3.02056533	Normal				abs	4.3093280557E-02
4	etaSr	a		1.06154810	Normal				abs	1.7973264655E-02
5	rd	a		2.28410362	Normal				abs	0.37337053813
6	mass	u	kg	2.0060E-02	Normal		8.190E-05		abs	8.190E-05
7	lamSr89	u	1/s	1.58650E-07	Normal				abs	
8	tBS	u	s	31807080.0	Normal				abs	
9	tAS	u	s	2679300.0	Normal				abs	
10	lamSr90	u	1/s	7.6266660E	Normal				abs	
11	lamSr85	u	1/s	1.23716670	Normal				abs	
12	tCS	u	s	31807080.0	Normal				abs	
13	CSr85V	u	Bq/g	5.210	Normal		4.2540E-02		abs	4.2540E-02
14	Fitp1	u		2.28410362	Normal				abs	0.37337053813

Eingabe von Kovarianzen/Korrelationen:

n	SymbolA	SymbolB	Typ	Formel	Wert
1	Fitp1	Fitp2	correlation		-9,103905E-01
2	Fitp2	Fitp3	correlation		-4,831312E-01
3	Fitp1	Fitp3	correlation		3,545014E-01
4					
5					
6					

Berechnung der Unsicherheiten

Projekt: D:\GF_Proj\UR2\DWL-LSC-3kanal-V2-fd_DE.txp Fertig!

Werte der Abklingkurve:

Netto-Blindwert-Zählrate: 1.000000E-07 **Hilfe**

Datum + Uhrzeit der Separation: 01.01.2005 12:12

Zeitbasis für Messdauer und Zählraten: s

Datumsformat: 01.01.2015 08:30:15

n	Startdatum (brutto)	Messdauer (brutto)	Impulse (brutto)	ZählRate (brutto)	u(ZählRate) (brutto)	Messdauer (UG)	Impulse (UG)	ZählRate (UG)	u(ZählRate) (UG)	ZählRate (netto)	u(ZählRate) (netto)
1	0.	7200.0	12849.0	1.784583333	1.574353188E-02	7200.0	177.0	2.458333333E-02	1.8477964855E-03	1.75999990	1.5851597653E-02
2	7920.	7200.0	12905.0	1.792361111	1.5777802230E-02	7200.0	175.0	2.430555555E-02	1.8373272994E-03	1.7680554555	1.5884420506E-02
3	15840.	7200.0	12931.0	1.795972222	1.5793688183E-02	7200.0	180.0	2.50E-02	1.8633899812E-03	1.7709721222	1.5903232648E-02
4	23760.	7200.0	13152.0	1.826666667	1.5928079096E-02	7200.0	178.0	2.472222222E-02	1.8530088978E-03	1.8019443445	1.6035502663E-02
5	31680.	7200.0	13222.0	1.836388889	1.5970410525E-02	7200.0	168.0	2.333333333E-02	1.8002057496E-03	1.8130554556	1.6071551048E-02
6	39600.	7200.0	12956.0	1.799444444	1.5808948083E-02	7200.0	183.0	2.541666667E-02	1.8788540637E-03	1.7740276777	1.5920205152E-02
7	47520.	7200.0	12865.0	1.786805556	1.5753331021E-02	7200.0	193.0	2.680555556E-02	1.9295061096E-03	1.75999990	1.5871056426E-02
8	55440.	7200.0	12814.0	1.779722222	1.5722074689E-02	7200.0	178.0	2.472222222E-02	1.8530088978E-03	1.75499990	1.5830866499E-02

Zählraten berechnen

OK **Abbrechen**

UncertRadio: Calculation of uncertainty budget and detection limits - DWD-LSC-3kanal-V2-fd_DE.txp

Datei Bearbeiten Optionen Hilfe

Verfahren Gleichungen Werte, Unsicherheiten Unsicherheitsbudget Resultate Text Editor

linfo.txt

Ergebnis der Abklingkurven-Analyse (mit Kovarianzen): Verfahren: NLSQ
LinFit(t) = a1*X1(t) + a2*X2(t) + a3*X3(t)

i	t (m)	X1(t)	X2(t)	X3(t)	NetRate (cps)	rUnc. (%)	LinFit (cps)	relDev (%)	uTest
1	0.00	0.01046	0.05635	0.18986	1.7599999	0.90	1.7769004	-1.0	-1.0
2	132.00	0.01045	0.05635	0.18968	1.760555	0.90	1.7763030	-0.5	-0.5
3	264.00	0.01043	0.05635	0.18949	1.7709721	0.90	1.7757061	-0.3	-0.3
4	396.00	0.01042	0.05635	0.18931	1.8019443	0.89	1.7751097	1.5	1.5
5	528.00	0.01041	0.05635	0.18912	1.8130555	0.89	1.7745139	2.2	2.2
6	660.00	0.01039	0.05635	0.18893	1.7740277	0.90	1.7739187	0.0	0.0
7	792.00	0.01038	0.05635	0.18875	1.7599999	0.90	1.7733240	-0.8	-0.8
8	924.00	0.01037	0.05635	0.18856	1.7549999	0.90	1.7727299	-1.0	-1.0
9	1056.00	0.01036	0.05635	0.18838	1.7880555	0.89	1.7721364	0.9	0.9
10	1188.00	0.01034	0.05635	0.18820	1.7530555	0.90	1.7715433	-1.0	-1.1
11	0.00	0.20940	1.04185	0.02471	22.3799999	0.25	22.3612609	0.1	0.2
12	132.00	0.20914	1.04185	0.02468	22.4099999	0.25	22.3604945	0.2	0.5
13	264.00	0.20887	1.04184	0.02466	22.4099999	0.25	22.3597279	0.2	0.5
14	396.00	0.20861	1.04184	0.02463	22.3499999	0.25	22.3589613	-0.0	-0.1
15	528.00	0.20835	1.04183	0.02461	22.3099999	0.25	22.3581947	-0.2	-0.5
16	660.00	0.20809	1.04183	0.02458	22.3499999	0.25	22.3574280	-0.0	-0.1
17	792.00	0.20783	1.04182	0.02456	22.2899999	0.25	22.3566613	-0.3	-0.7
18	924.00	0.20757	1.04182	0.02454	22.3299999	0.25	22.3558947	-0.1	-0.3
19	1056.00	0.20730	1.04181	0.02451	22.3599999	0.25	22.3551280	0.0	0.1
20	1188.00	0.20704	1.04181	0.02449	22.3899999	0.25	22.3543614	0.2	0.4
21	0.00	0.26918	0.54037	0.00707	11.9699999	0.34	11.9474366	0.2	0.4
22	132.00	0.26884	0.54037	0.00707	11.9999999	0.34	11.9466549	0.4	0.9
23	264.00	0.26850	0.54037	0.00706	12.0099999	0.34	11.9458723	0.5	1.0
24	396.00	0.26817	0.54037	0.00705	11.9599999	0.34	11.9450889	0.1	0.2
25	528.00	0.26783	0.54037	0.00705	11.9299999	0.34	11.9443047	-0.1	-0.2
26	660.00	0.26749	0.54037	0.00704	11.8299999	0.34	11.9435197	-1.0	-1.9
27	792.00	0.26716	0.54037	0.00703	11.8999999	0.34	11.9427340	-0.4	-0.7

Schließen Speichern unter

Zwischenergebnis aus dem Zählratenkurvenfit

(10 Messungen in 3 LSC-Energiefenstern)

Kanal A

Kanal B

Kanal C

TAB

Unsicherheitsbudget

(relative Budget-Komponenten in %;
absolute Komponentenwerte können mit dem Button über der Tabelle selektiert werden)

UncertRadio: Calculation of uncertainty budget and detection limits - DWD-LSC-3kanal-V2-fd_DE.txp

Datei Bearbeiten Optionen Hilfe

Verfahren Gleichungen Werte, Unsicherheiten Unsicherheitsbudget Resultate Text Editor

Wechseln des Budget-Typs Hilfe

Tabelle des Unsicherheiten-Budgets for cSr89 :

n	Symbol	Typ	Einheit	Wert	StdAbwWert	Sensit.-Koeffizient	rel. Beitrag(%)
1	cSr89	a	Bq/kg	10898.660109	1734.8436892	0.0	100.0
2	cSr90	a	Bq/kg	1005.0657240	20.006713354	0.0	0.0
3	ASr85	a	Bq	3.0205653352	4.3093280557E-02	0.0	0.0
4	etaSr	a		1.0615481046	1.7973264655E-02	0.0	0.0
5	rd	a		2.2841036237	0.37337053813	0.0	0.0
6	mass	u	kg	2.0060E-02	8.190E-05	4.4276092706E-05	0.0
7	lamSr89	u	1/s	1.58650E-07	0.0	0.0	0.0
8	tBS	u	s	31807080.0	0.0	0.0	0.0
9	tAS	u	s	2679300.0	0.0	0.0	0.0
10	lamSr90	u	1/s	7.6266660E-10	0.0	0.0	0.0
11	lamSr85	u	1/s	1.23716670E-07	0.0	0.0	0.0
12	tCS	u	s	31807080.0	0.0	0.0	0.0
13	cSr85V	u	Bq/g	5.210	4.2540E-02	2091.8733416	0.26311465653
14	Fitp1	u	Bq	2.2841036237	0.37337053813	4771.5261232	102.19554252
15	Fitp2	u	Bq	20.932317421	0.13149071922	0.0	0.0
16	Fitp3	u	Bq	3.0205653352	4.3071159939E-02	-3608.152411	-2.458657179
17	Rbl	u	1/s	1.0E-07	0.0	0.0	0.0
18	eSr85A	u		0.26460	1.080E-03	0.0	0.0
19	eSr85B	u		3.4430E-02	1.4060E-04	0.0	0.0
20	eSr85C	u		9.8580E-03	4.0250E-05	0.0	0.0
21	eSr90A	u		4.7940E-02	1.9570E-04	0.0	0.0
22	eSr90B	u		0.79190	3.2330E-03	0.0	0.0

Projekt: D:\GF_Proj\UR2\|DWD-LSC-3kanal-V2-fd_DE.txp Fertig!

Fertig!

UncertRadio: Calculation of uncertainty budget and detection limits - DWD-LSC-3kanal-V2-fd_DE.txp

Datei Bearbeiten Optionen Hilfe

Verfahren Gleichungen Werte, Unsicherheiten Unsicherheitsbudget Resultate Text Editor

Gesamtes Messergebnis für cSr89 :

Erweiterungsfaktor k:	1,0
Wert der Ergebnisgröße:	10898,66 Bq/kg
erweiterte (Std.-)Unsicherheit:	1734,844 Bq/kg
relative erw. (Std.-)Unsicherheit:	15,91795 %

Beste Schätzwerte nach Bayes:

Wert der Ergebnisgröße:	10898,66 Bq/kg
erweiterte (Std.-)Unsicherheit:	1734,844 Bq/kg
untere Vertrauengrenze:	7498,429 Bq/kg
obere Vertrauengrenze:	14298,89 Bq/kg

Wahrscheinlichkeit (1-gamma): 0,950

Erkennungs- und Nachweisgrenze für cSr89 :

Erkennungsgrenze (EKG):	2923,170 Bq/kg
Nachweisgrenze (NWG):	5805,050 Bq/kg

Iterationen: 1
Iterationen: 4

k_alpha=1.645, k_beta=1.645 Methode: ISO 11929:2010, iterativ

NLSQ: Standardunsicherheiten des Fitparameters:

aus LS-Analyse:	0,3733705 Bq
aus Unsicherheitsfortpflanzung:	0,3733357 Bq
reduziertes Chi-Quadrat:	1,2723

Monte Carlo Simulation:

Anzahl der simul. Messungen 50000 Werte <0 einbezogen
Anzahl der Runs: 1 min. Coverage-Intervall
rSD%:

Wert der Ergebnisgröße:	10891,97 Bq/kg 0,072
erweiterte Unsicherheit:	1749,164 Bq/kg 0,316
relative erw. Unsicherheit:	16,05921 %
untere Vertrauengrenze:	7428,208 Bq/kg 0,281
obere Vertrauengrenze:	14299,47 Bq/kg 0,146
Erkennungsgrenze (EKG):	2878,931 Bq/kg 0,575
Nachweisgrenze (NWG):	5800,418 Bq/kg 0,404

aktiver Run: 1 IT: 9 Start MC

Projekt: D:\GF_Proj\UR2\ DWD-LSC-3kanal-V2-fd_DE.txp Fertig!

TAB Resultate

Angabe der nach ISO 11929 analytisch erhaltenen Ergebnisse im oberen Bereich

UncertRadio: Calculation of uncertainty budget and detection limits - DWD-LSC-3kanal-V2-fd_DE.txp

Datei Bearbeiten Optionen Hilfe

Verfahren Gleichungen Werte, Unsicherheiten Unsicherheitsbudget Resultate Text Editor

Gesamtes Messergebnis für cSr89 :

Erweiterungsfaktor k:	1,0
Wert der Ergebnisgröße:	10898,66 Bq/kg
erweiterte (Std.-)Unsicherheit:	1734,844 Bq/kg
relative erw. (Std.-)Unsicherheit:	15,91795 %

Beste Schätzwerte nach Bayes:

Wert der Ergebnisgröße:	10898,66 Bq/kg
erweiterte (Std.-)Unsicherheit:	1734,844 Bq/kg
untere Vertrauengrenze:	7498,429 Bq/kg
obere Vertrauengrenze:	14298,89 Bq/kg

Wahrscheinlichkeit (1-gamma): 0,950

Erkennungs- und Nachweisgrenze für cSr89 :

Erkennungsgrenze (EKG):	2923,170 Bq/kg
Nachweisgrenze (NWG):	5805,050 Bq/kg

Iterationen: 1
Iterationen: 4

k_alpha=1.645, k_beta=1.645 Methode: ISO 11929:2010, iterativ

NLSQ: Standardunsicherheiten des Fitparameters:

aus LS-Analyse:	0,3733705 Bq
aus Unsicherheitsfortpflanzung:	0,3733357 Bq
reduziertes Chi-Quadrat:	1,2723

Monte Carlo Simulation:

Anzahl der simul. Messungen 50000 Werte <0 einbezogen
Anzahl der Runs: 1 min. Coverage-Intervall
rSD%:

Wert der Ergebnisgröße:	10891,97 Bq/kg 0,072
erweiterte Unsicherheit:	1749,164 Bq/kg 0,316
relative erw. Unsicherheit:	16,05921 %
untere Vertrauengrenze:	7428,208 Bq/kg 0,281
obere Vertrauengrenze:	14299,47 Bq/kg 0,146
Erkennungsgrenze (EKG):	2878,931 Bq/kg 0,575
Nachweisgrenze (NWG):	5800,418 Bq/kg 0,404

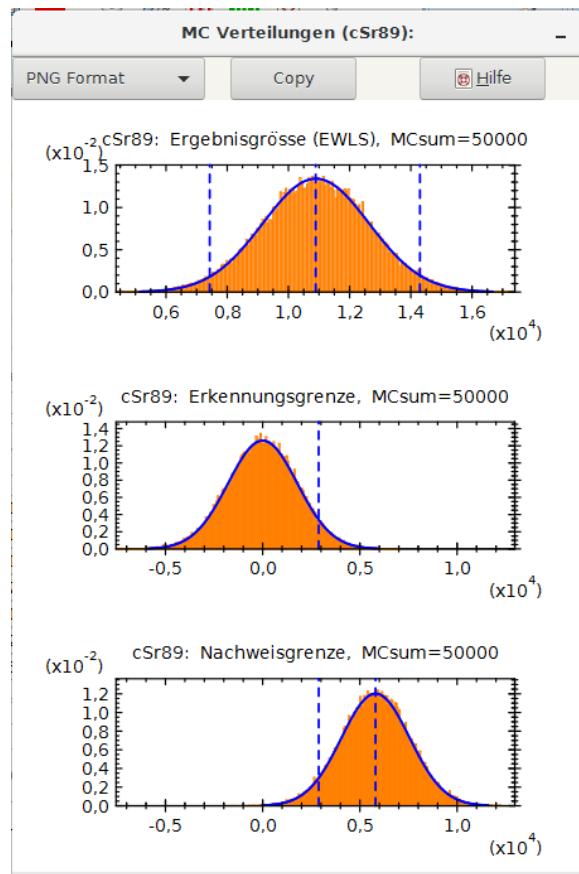
aktiver Run: 1 IT: 9 Start MC

Projekt: D:\GF_Proj\UR2\ DWD-LSC-3kanal-V2-fd_DE.txp Fertig!

TAB Resultate

Mit dem Button **Save to csv** können die Werte als neue Zeile an eine "permanente" CSV-Datei angehängt werden

Angabe der Ergebnisse einer Monte Carlo Simulation

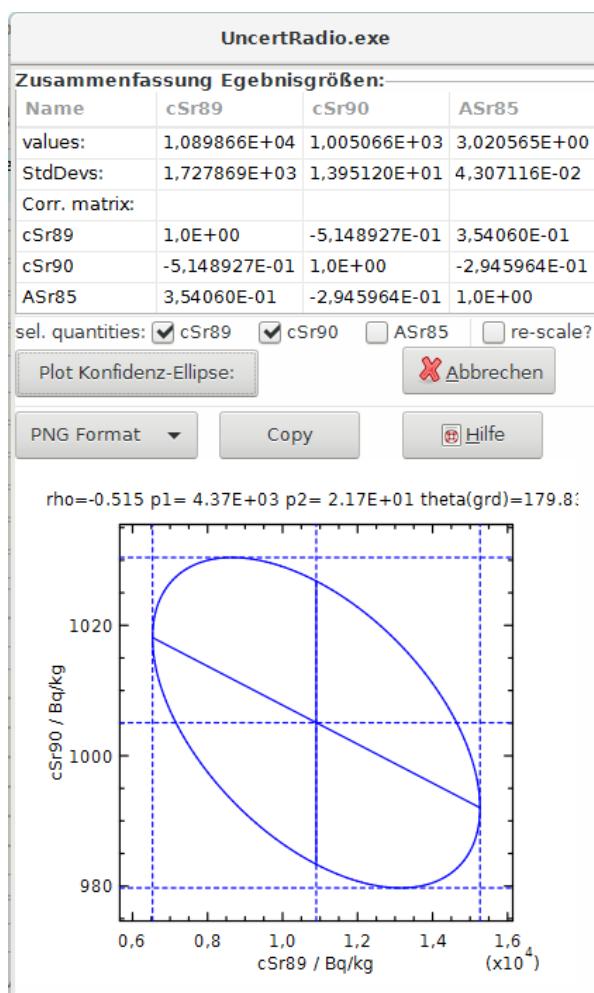


TAB Resultate

MC Verteilungen von
Ergebnisgröße,
Erkennungsgrenze,
Nachweisgrenze;

blaue Kurven: ISO 11929
analytisch

das Grafikfeld kann in eine
Grafikdatei geschrieben
werden
(Kopie in die Windows-
Zwischenablage nicht
mehr möglich)



Menü Optionen – Berechnen einer Konfidenz-Ellipse

Zeigt die
Korrelationsmatrix der
Ergebnisgrößen;

zeigt die Konfidenz-
Ellipse zweier
selektierter
Ergebnisgrößen

Windows-Hilfe für UncerRadio

Ausblenden Suchen Zurück Vorfwärts Abbrechen Aktualisieren Startseite Drucken Optionen

Inhalt Index Suchen Favoriten

Windows-Hilfe für UncerRadio TAB Resultate

Bedeutung des TABs "Resultate"

Unter diesem Tab, per Mausklick angezeigt, werden für die Ergebnisgröße das gesamte Messergebnis einschließlich einer Reihe von weiteren Kenngrößen sowie die Werte der Erkennungs- und der Nachweigsgrenze dargestellt. Es wird angezeigt, auf welche Ergebnisgröße sich die Resultate beziehen.

Dies sind im Einzelnen:

das Messergebnis:

- der Wert der Ergebnisgröße (die aktuell gewählte Ergebnisgröße, falls mehrere vorliegen)
- die erweiterte Unsicherheit, in der Einheit der Ergebnisgröße
- die relative erweiterte Unsicherheit (in %)
- der Erweiterungsfaktor (kann über das Menü Optionen geändert werden)

beste Schätzwerte nach Bayes und Vertrauengrenzen (vgl. hierzu DIN ISO 11929:2010 und DIN 25482-10):

- der Wert der Ergebnisgröße
- die erweiterte Unsicherheit
- der Wert der unteren Vertrauengrenze
- der Wert der oberen Vertrauengrenze
- Wahrscheinlichkeit ($1 - \alpha$) zum Vertrauensbereich

Erkennungs- und Nachweigsgrenze:

- der Wert der Erkennungsgrenze mit der Anzahl der dafür benötigten Iterationen
- der Wert der Nachweigsgrenze mit der Anzahl der dafür benötigten Iterationen
- die dafür verwendeten Quantile der Normalverteilung $k_{\alpha} = k_{1-\alpha}$ und $k_{\beta} = k_{1-\beta}$

LLSQ bzw. TLSQ: Standardunsicherheiten des der Ergebnisgröße entsprechenden Fitparameters bei Analyse einer Abklingkurve:

- die Unsicherheit, die sich aus der Least Squares-Analyse ergibt; diese wird NICHT mit $\sqrt{\chi^2_R}$ multipliziert, falls der Wert des reduzierten Chi-Quadrat größer als 1 ist; diese Variante der Unsicherheit der Nettozährlate wird für die Bestimmung der Unsicherheit der Ergebnisgröße verwendet;
- der Wert der Unsicherheit, der sich aus der Fortpflanzung der Unsicherheiten der Argumente der LinFit-Funktion (vor allem die Nulleffektkzährlate, ggf. mit Blindwertanteil) und der Unsicherheiten der Bruttozährlaten der Abklingkurve ergibt
- der Wert des reduzierten Chi-Quadrat $\sqrt{\chi^2_R}$

Monte Carlo Simulation:

- Eingabe der gewünschten Anzahl N von simulierten Berechnungen für die Ergebnisgröße (ein Run)
- Festlegung der Anzahl r der Runs
- Optional Wahl der Vertrauengrenzen kürzester Länge (kleinstes coverage interval)

Die MC Simulation wird mit dem Button "Start" gestartet. Während der iterativen Ermittlung der Verteilung der Nachweigsgrenze wird die Nummer der Iteration angezeigt.

Aus der r -fachen Wiederholung (Runs) werden jeweils ein Mittelwert und seine relative Streustandardabweichung (in %) ermittelt, und zwar für:

Beste Schätzwerte nach Bayes:

UncerRadio V2.0.1 2016/01 (G. Kanisch, TI-FI)

Beispiel der
UR2 Windows CHM-Hilfe

Spezielle Themen
können auch mit dem in
den verschiedenen
Dialogen verfügbaren
Help-Buttons
aufgerufen werden

Windows-Hilfe für UncerRadio

Ausblenden Suchen Zurück Vorfwärts Abbrechen Aktualisieren Startseite Drucken Optionen

Inhalt Index Suchen Favoriten

Windows-Hilfe für UncerRadio Anwendungen in UR

Im Falle der linearen Entfaltung liegen mehrere Gleichungen des Typs

$$x_i = \sum_{k=1}^n A_{k,i} y_k$$

vor, oder in Matrixschreibweise (A enthält die $X_i(t_k)$ -Terme):

$$x = A y \quad (9)$$

In diesem Falle stehen die Ergebnisgrößen Y auf der rechten Seite und die Eingangsgrößen auf der linken Seite der Gleichung. Das lineare Least squares-Verfahren liefert als Auflösung dieses Systems von Gleichungen bekanntlich:

$$y = U_y A^T U_x^{-1} (x) \quad ; \quad y = U_y = (A^T U_x^{-1} (x) A)^{-1} \quad (10a,b)$$

Im nächsten Schritt wird davon ausgegangen, dass die Elemente der Matrix A , bei der Analyse von Abklingkurven z.B. zusammengesetzte Abklingfaktoren, nun weitere Parameter (als Vektor p mit Kovarianzmatrix U_p bezeichnet) enthalten können, die auch mit Unsicherheiten behaftet sind. Dann kann mit einer Transformationsmatrix C_p der numerisch berechneten partiellen Ableitungen $C_{p;i,k} = \partial Y_i / \partial p_k$ die erweiterte Kovarianzmatrix U_p berechnet werden (der Vektor y erfährt dabei keine Modifikation; hier wird anstelle von Q die Bezeichnung C_p gewählt):

$$y = (A^T U_x^{-1} (x) A)^{-1} + C_p U_p C_p^T \quad (11)$$

Für jeden einzelne Kombination $y_i(p_k \pm \Delta p_k)$ (mit $\Delta p_k = 1 \cdot 10^{-6} p_k$) in der numerischen Approximation für die partielle Ableitung

$$C_{p;i,k} = \frac{\partial y_i}{\partial p_k} \approx \frac{y_i(p_k + \Delta p_k) - y_i(p_k)}{\Delta p_k} \quad (12)$$

müssen dazu die Matrix A , der Ergebnisvektor y und seine Kovarianzmatrix U_p neu berechnet werden.

Alternativ kann man den zweiten Term in Gl. (11) durch Anwendung der Kettenregel für Ableitungen wie folgt ersetzen:

$$C_p U_p C_p^T = (C_A D_p) U_p (C_A D_p)^T = C_A (D_p U_p D_p^T) C_A^T = C_A U_A C_A^T$$

Dabei bedeuten: C_A : Matrix der partiellen Ableitungen von y_i nach den Elementen der Matrix A , D_p : Matrix der partiellen Ableitungen der Elemente von A nach den Parametern p , U_A : Kovarianzmatrix der Elemente von A , die wiederum Funktionen von p sind. Die verwendete „Kettenregel“ für partielle Ableitungen hat die Form $C_p = C_A D_p$, mit der Eigenschaft $C_p^T = D_p^T C_A^T$.

Speziell der Ausdruck $C_A U_A C_A^T$ wird im TLSQ-Fitverfahren benötigt; er wird in einer Subroutine berechnet, die von den Fitverfahren NLSQ und TLSQ gemeinsam genutzt werden kann. Die Matrix U_A wird programmintern so berechnet wie im vorgehenden Unterkapitel beschrieben.

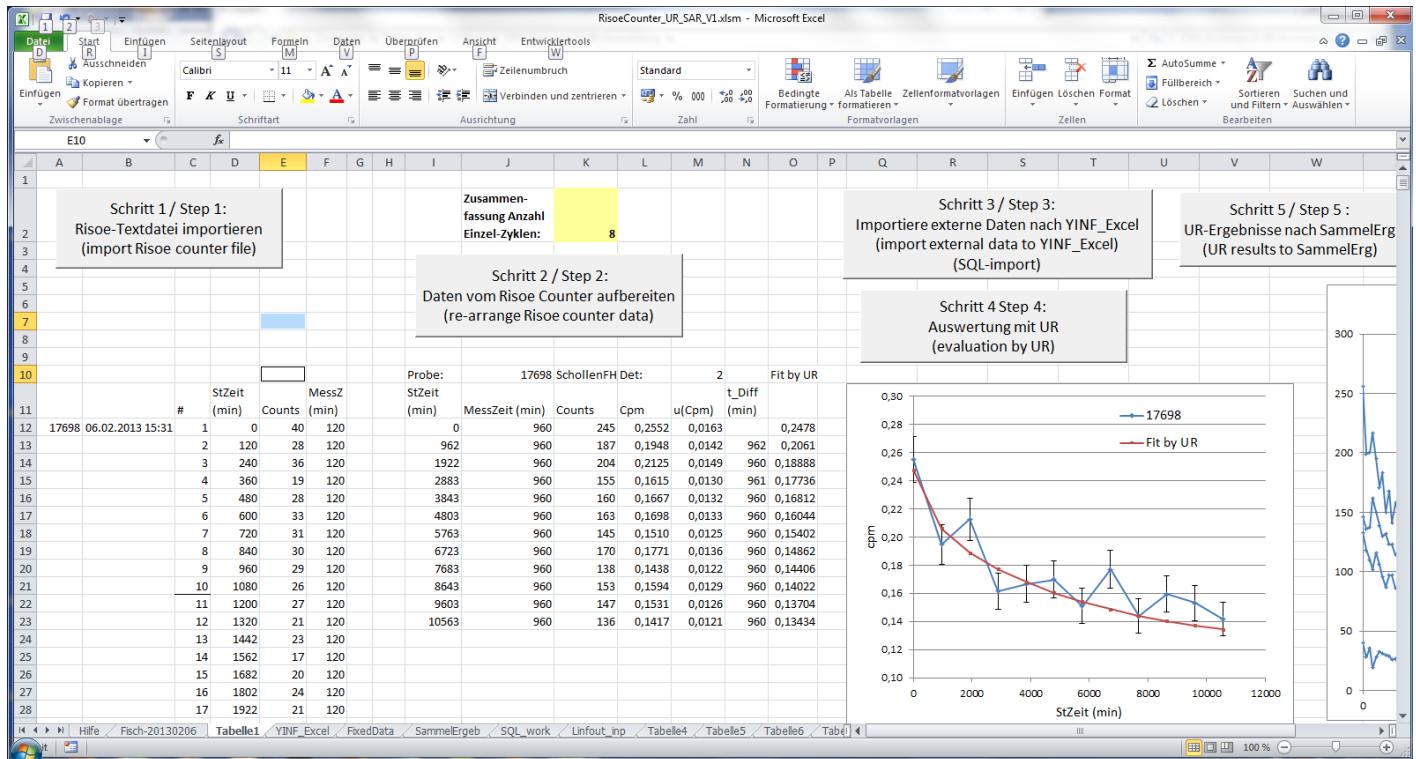
UncerRadio V2.0.1 2016/01 (G. Kanisch, TI-FI)

Beispiel der
UR2 Windows CHM-Hilfe

UR kann mittlerweile aus einer speziellen Excelanwendung heraus aufgerufen werden Solch ein Beispiel ist unten abgebildet.

Darin werden Daten einer Y-90-Zerfallskurve aus einer Textdatei eines Betacounters (Risø GM Counter) gelesen. Nach deren Umsortieren und dem SQL-Import zusätzlicher Daten zur Charakterisierung der Probe werden sie in Tabelle4 dieser Exceldatei transferiert, welche das UR-Projekt im CSV-Format enthält. Die modifizierte Tabelle4 wird in eine externe CSV-Datei exportiert, diese Datei mit UR ausgewertet und schließlich die Ergebniswerte nach Tabelle5 dieser Exceldatei reimportiert.

Die einzelnen Transfers werden mit VBA-Modulen in der Exceldatei ausgeführt.



Unten: der unterer Bereich der Tabelle „Tabelle4“, die das UR-Projekt im CSV-Format enthält; diese Tabelle wird im unteren Bereich (Werte, Unsicherheiten, etc.) für jede Probenauswertung aktualisiert.

C71													
A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	
64 Werte, Unsicherheiten:													
65 1 a		1,17E-03		1		-9,99E+02	-9,99E+02		1	1,43E-04			
66 2 phi		5,03E-01		1		-9,99E+02	-9,99E+02		1	1,23E-02			
67 3 Rn		2,32E-03		1		-9,99E+02	-9,99E+02		1	2,79E-04			
68 4 f1		1,04E+00		1		-9,99E+02	-9,99E+02		1	1,67E-04			
69 5 eps		4,19E-01		1		2,50E-02	-9,99E+02		2	4,10E-03			
70 6 etaY		7,92E-01		1		2,00E-02	-9,99E+02		2	1,76E-02			
71 7 ma		5,11E+01		1		4,00E-03	-9,99E+02		2	3,00E-02			
72 8 FA		4,75E+01		1		2,00E-02	-9,99E+02		2	7,34E-01			
73 9 Rbl		4,67E-06		1		2,83E-07	-9,99E+02		1	2,83E-05			
74 10 HwzY90		2,31E+05		1		1,12E+02	-9,99E+02		1	1,12E+02			
75 11 Hwzlong		1,00E+14		1		-9,99E+02	-9,99E+02		1	-9,99E+02			
76 12 HwzAc228		2,21E+04		1		-9,99E+02	-9,99E+02		1	-9,99E+02			
77 13 tmess		7,20E+04		1		-9,99E+02	-9,99E+02		1	-9,99E+02			
78 14 tstart		0,00E+00		1		-9,99E+02	-9,99E+02		1	-9,99E+02			
79 15 tprobe		4,29E+02		1		2,10E-01	-9,99E+02		1	2,00E-01			
80 16 HWZSR90		1,05E+04		1		2,56E+01	-9,99E+02		1	2,56E+01			
81 CovarGrid:													
82 AbklingGrid: fitp1?		fitp2?	fitp3?		weighted f.	use covs?	fitmeth?	time base(s/m):					
83 ModPar		1	0		1	1	1	1					
84 Trenn-Datum		07.02.2013 07:37											
85 1	07.02.2013 15:33	5,76E+04	8,68E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	2,88E+05	6,24E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	-9,99E+02			
86 2	08.02.2013 07:33	5,76E+04	7,07E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	2,88E+05	6,24E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	-9,99E+02			
87 3	08.02.2013 23:34	5,76E+04	5,91E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	2,88E+05	6,24E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	-9,99E+02			
88 4	09.02.2013 15:34	5,76E+04	4,95E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	2,88E+05	6,24E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	-9,99E+02			
89 5	10.02.2013 07:34	5,76E+04	4,63E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	2,88E+05	6,24E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	-9,99E+02			
90 6	10.02.2013 23:34	5,76E+04	3,65E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	2,88E+05	6,24E+02	-9,99E+02	-9,99E+02	-9,99E+02			
91 7	11.02.2013 15:34	57600	357	-999	-999	288000	624	-999	-999	-999			
92 8	12.02.2013 07:34	57600	303	-999	-999	288000	624	-999	-999	-999			
93 9	12.02.2013 23:34	57600	292	-999	-999	288000	624	-999	-999	-999			
94 10	13.02.2013 15:34	57600	264	-999	-999	288000	624	-999	-999	-999			