

DIN ISO 11929



ICS 17.240

Ersatzvermerk
siehe unten

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

Gesamtumfang 82 Seiten

DKE Deutsche Kommission Elektrotechnik Elektronik Informationstechnik im DIN und VDE
Normenausschuss Materialprüfung (NMP) im DIN
Normenausschuss Radiologie (NAR) im DIN



Inhalt

	Seite
Nationales Vorwort.....	4
Nationaler Anhang NA (informativ) Zusammenhang mit Europäischen und Internationalen Normen.....	5
Nationaler Anhang NB (informativ) Literaturhinweise.....	6
Nationaler Anhang NC (informativ) Anwendungen bei Messungen mit Albedodosimetern.....	7
Einleitung	24
1 Anwendungsbereich	24
2 Normative Verweisungen	25
3 Begriffe	25
4 Größen und Formelzeichen.....	28
5 Grundlagen	29
5.1 Allgemeines zur Messgröße	29
5.2 Modell	29
5.3 Berechnung der Standardunsicherheit als Funktion der Messgröße.....	31
6 Festlegung der charakteristischen Grenzen und Beurteilungen.....	33
6.1 Vorgaben	33
6.2 Festlegung der Erkennungsgrenze	33
6.3 Festlegung der Nachweisgrenze.....	33
6.4 Festlegung der Vertrauensgrenzen.....	35
6.5 Beurteilung eines Messergebnisses.....	36
6.6 Beurteilung eines Messverfahrens.....	37
7 Prüfbericht	37
Anhang A (informativ) Übersicht zum allgemeinen Verfahren	38
Anhang B (normativ) Einzelne Anwendungen.....	40
Anhang C (normativ) Anwendungen bei zählenden spektrometrischen Messungen.....	46
Anhang D (informativ) Anwendungsbeispiele.....	58
Anhang E (informativ) Verteilungsfunktion der standardisierten Normalverteilung.....	72
Anhang F (informativ) Erläuterungen.....	74
Literaturhinweise.....	81
Bild 1 – Iterative Berechnung der Nachweisgrenze.....	34
Bild 2 – Bester Schätzwert und Vertrauensgrenzen.....	36
Bild C.1 – Anordnung der Kanalbereiche zur Ermittlung des Untergrundes einer Linie	49
Bild F.1 – Illustration der Wahrscheinlichkeitsverteilung nach Gleichung (F.5) für eine nicht negative Messgröße y	76
Bild F.2 – Illustration der Funktion $\hat{u}^2(\bar{y})$ und der Interpolationsformel nach Gleichung (19).....	77
Bild F.3 – Erkennungsgrenze y^* und Nachweisgrenze $y^\#$	78
Bild F.4 – Definition der Vertrauensgrenzen und des besten Schätzwertes	80

Tabelle NC.1 – Angenommene Werte und Standardunsicherheiten der Eingangsgrößen bei der Ermittlung von H_γ und H_n mittels Albedodosimetern im Beispiel NC.6	15
Tabelle NC.2 – Unsicherheitsbudget der Photonendosis zum Messwert H_γ	16
Tabelle NC.3 – Unsicherheitsbudget der Photonendosis an der Erkennungsgrenze H_γ^*	17
Tabelle NC.4 – Unsicherheitsbudget der Photonendosis an der Nachweisgrenze $H_\gamma^\#$	18
Tabelle NC.5 – Unsicherheitsbudget der Neutronendosis zum Messwert H_n	19
Tabelle NC.6 – Unsicherheitsbudget der Neutronendosis an der Erkennungsgrenze H_n^*	20
Tabelle NC.7 – Unsicherheitsbudget der Neutronendosis an der Nachweisgrenze $H_n^\#$	21
Tabelle D.1 – Eingangsdaten, Zwischenwerte und Ergebnisse zu Beispiel 1	60
Tabelle D.2 – Eingangsdaten, Zwischenwerte und Ergebnisse zu Beispiel 2	63
Tabelle D.3 – Eingangsdaten, Zwischenwerte und Ergebnisse zu Beispiel 3	65
Tabelle D.4 – Eingangsdaten, Zwischenwerte und Ergebnisse zu den Beispielen 4, 5 und 6	68
Tabelle D.5 – Daten des Vielkanal-Spektrums zu den Beispielen 5 und 6	70
Tabelle E.1 – Verteilungsfunktion $\Phi(t)$ der standardisierten Normalverteilung	73

Nur für die Normungsarbeit

Nationales Vorwort

Vorausgegangener Norm-Entwurf: E DIN ISO 11929:2008-06.

Die Internationale Norm 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“ ist unverändert in diese Norm übernommen worden.

Das internationale Dokument wurde vom SC 2 „Radiation protection“ des TC 85 „Nuclear Energy“ der Internationalen Organisation für Normung (ISO) erarbeitet und den nationalen Komitees zur Stellungnahme und Abstimmung vorgelegt.

Diese Norm basiert wie die vorangegangenen ISO 11929-5 bis -8 auf der Bayes-Statistik, d. h. entsprechend [6] bis [19] können bei ihrer Anwendung auch solche unsicheren Größen und Einflüsse berücksichtigt werden, die sich bei mehrmals wiederholten oder bei zählenden Messungen nicht zufällig verhalten.

Im Zuge der Revision wurde entschieden, dass die überarbeiteten ISO 11929-1 bis -3 und die ISO 11929-4 bis -8 in ein einziges konsistentes Dokument zusammengeführt werden, weil sie alle auf der gleichen Prozedur aufbauen, die zur Berechnung von charakteristischen Grenzen gebraucht wird.

Ebenso wie ISO 11929:2010 alle Publikationen der Reihe ISO 11929 ersetzt werden mit dieser Norm alle Normen der Reihe DIN 25482 ersetzt. Die Zuordnung zwischen beiden Normenreihen ist DIN VDE 0493 Beiblatt 1 (VDE 0493 Beiblatt 1):2006-09 zu entnehmen.

In der Normenreihe DIN 25482 gab es eine historisch bedingte systematische Inkonsistenz. DIN 25482-1 bis -7 beruhten auf konventioneller Statistik während DIN 25482-10 bis -13 bereits auf der Grundlage der Bayes-Statistik entwickelt wurden. Diese Inkonsistenz wird durch die Übernahme von ISO 11929:2010 behoben.

Für diese Norm ist das nationale Arbeitsgremium GUK 967.2 „Aktivitätsmessgeräte für den Strahlenschutz“ der DKE Deutsche Kommission Elektrotechnik Elektronik Informationstechnik im DIN und VDE (www.dke.de), Gemeinschaftsgremium mit dem Normenausschuss Radiologie (NAR) im DIN, zuständig. Für die konzentrierte Detailbehandlung hat dieses den Arbeitskreis GAK 967.2.1 „Nachweis- und Erkennungsgrenzen bei Kernstrahlungsmessungen“ eingesetzt.

Änderungen

Gegenüber 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 wurden folgende Änderungen vorgenommen:

- Zusammenfassung zu einem Kerndokument mit Anwendungsbeispielen in den Anhängen.
- Durchgängige Anwendung der Bayes-Statistik nach dem Vorbild der DIN 25482-10:2000-05, um die Messunsicherheiten nach ISO/IEC Guide 98-3, *Uncertainty of measurement – Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement* vollständig berücksichtigen zu können (Typ-B-Unsicherheiten konnten mit der konventionellen Statistik nicht behandelt werden).
- Statt Häufigkeiten und Hypothesentests zu betrachten, wird allein auf der Basis von Wahrscheinlichkeiten unter Berücksichtigung der unvollständigen Information über die Messgröße eine Entscheidung darüber getroffen, ob ein physikalischer Effekt bei der Messung der Messgröße vorliegt oder nicht;
- Einführung von Formelzeichen mit einheitlicher Systematik: physikalische Größen werden mit Großbuchstaben bezeichnet und sorgfältig von ihren Werten unterschieden, die mit den entsprechenden Kleinbuchstaben bezeichnet werden.
- Die Anwendungen bei Messungen mit Albedodosimetern (bisher DIN 25482-11:2003-02) werden wegen der besonderen nationalen Bedeutung im Nationalen Anhang NC dieser Norm behandelt.
- Es ist vorgesehen, einführende Informationen in einem Beiblatt zu veröffentlichen, nach dem Vorbild der Einführung der Anwendung in ISO/IEC Guide 98-3, *Uncertainty of measurement – Part 3: Guide to the*

expression of uncertainty in measurement mit DIN VDE 0493 Beiblatt 2 (VDE 0493 Beiblatt 2):2007-06, *Strahlenschutz-Messgeräte – Bestimmung der Unsicherheit beim Messen* (IEC/TR 62461:2006).

Auch wenn das Ergebnis der Überarbeitung teilweise zu den gleichen Gleichungen führt, ist doch die Begründung auf der Basis der Bayes-Statistik vollkommen unterschiedlich. Insbesondere bekommt der Begriff Wahrscheinlichkeit eine andere Bedeutung, die über die einfache Betrachtung von Häufigkeiten für Ergebnisse aus wiederholten Messungen und die Statistiken des Kernzerfalls hinausgeht.

Frühere Ausgaben

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
 DIN 25482-13: 2003-02

Nationaler Anhang NA (informativ)

Zusammenhang mit Europäischen und Internationalen Normen

Für den Fall einer undatierten Verweisung im normativen Text (Verweisung auf eine Norm ohne Angabe des Ausgabedatums und ohne Hinweis auf eine Abschnittsnummer, eine Tabelle, ein Bild usw.) bezieht sich die Verweisung auf die jeweils neueste gültige Ausgabe der in Bezug genommenen Norm.

Für den Fall einer datierten Verweisung im normativen Text bezieht sich die Verweisung immer auf die in Bezug genommene Ausgabe der Norm.

Eine Information über den Zusammenhang der im Hauptteil dieser Norm zitierten Normen mit den entsprechenden Deutschen Normen ist in Tabelle NA.1 wiedergegeben.

Tabelle NA.1

Europäische Norm	Internationale Norm	Deutsche Norm	Klassifikation im VDE-Vorschriftenwerk
–	ISO 31-0	–	–
–	ISO 31-9	–	–
–	ISO 3534-1	DIN ISO 3534-1	–
–	ISO/IEC Guide 98-3:2008	–	–
ENV 13005:1999	GUM:1995	Siehe DIN V ENV 13005:1999-06	–
–	–	Für Strahlungsmessungen DIN VDE 0493 Bbl 2 (VDE 0493 Bbl 2):2007-06	VDE 0493 Bbl 2
–	ISO/IEC Guide 99:2007	–	–

Nationaler Anhang NB (informativ)

Literaturhinweise

DIN V ENV 13005:1999-06, *Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen*; Deutsche Fassung ENV 13005:1999

DIN ISO 3534-1, *Statistik – Begriffe und Formelzeichen – Teil 1: Wahrscheinlichkeit und allgemeine statistische Begriffe*

DIN VDE 0493 Beiblatt 2 (VDE 0493 Beiblatt 2):2007-06, *Strahlenschutz-Messgeräte – Bestimmung der Unsicherheit beim Messen (IEC/TR 62461:2006)*

Nationaler Anhang NC (informativ)

Anwendungen bei Messungen mit Albedodosimetern

NC.1 Einleitung

Die vorliegende Norm kann auch bei Messungen mit Albedodosimetern bei der getrennten Ermittlung der Photonen- und Neutronenkomponente der Tiefen-Personendosis $H_p(10)$ nach DIN 6802-4 angewendet werden.

NC.2 Normative Verweisungen

Dieser Anhang NC enthält durch datierte oder undatierte Verweisungen Festlegungen aus anderen Publikationen. Diese normativen Verweisungen sind an den jeweiligen Stellen im Text zitiert, und die Publikationen sind nachstehend aufgeführt. Bei datierten Verweisungen gehören spätere Änderungen oder Überarbeitungen nur zu dieser Norm, falls sie durch Änderung oder Überarbeitung eingearbeitet sind. Bei undatierten Verweisungen gilt die letzte Ausgabe der in Bezug genommenen Publikation (einschließlich Änderungen).

DIN 6802-1, *Neutronendosimetrie – Teil 1: Spezielle Begriffe und Benennungen*

DIN 6802-2, *Neutronendosimetrie – Teil 2: Konversionsfaktoren zur Berechnung der Orts- und Tiefen-Personendosis aus der Neutronenfluenz und Korrekturfaktoren für Strahlenschutz-Dosimeter*

DIN 6802-4, *Neutronendosimetrie – Teil 4: Verfahren zur Personendosimetrie mit Albedodosimetern*

DIN 6814-3, *Begriffe in der radiologischen Technik – Teil 3: Dosisgrößen und Dosiseinheiten*

DIN IEC 61066 (VDE 0492-3-2):2007-02, *Thermolumineszenz-Dosimetriesysteme zur Personen- und Umweltüberwachung (IEC 61066:2006)*

DIN 25483, *Verfahren zur Umgebungsüberwachung mit integrierenden Festkörperdosimetern*

NC.3 Begriffe

Für die Anwendung dieser Norm gelten die Begriffe nach DIN 6802-1, DIN 6802-2, DIN 6802-4, DIN 6814-3 und die folgenden.

NC.3.1

Messgröße der Personendosis (bei Messungen mit Albedodosimetern)

Tiefen-Personendosis $H_p(10)$

[DIN 6814-3]

ANMERKUNG 1 Definitionsgrundlage für die Dosisgrößen der Orts- und Personendosimetrie, die sogenannten „operativen Größen“ der Strahlenschutz-Messtechnik, ist die Äquivalentdosis. Die Personendosis ist in allgemeiner Form definiert als Äquivalentdosis gemessen an der für die Strahlenexposition repräsentativen Stelle der Körperoberfläche und damit eine Punktgröße. Als Personendosis gilt bei durchdringender Strahlung die Messgröße Tiefen-Personendosis $H_p(10)$. Die Tiefen-Personendosis $H_p(10)$ ist die Äquivalentdosis in 10 mm Tiefe im Körper an der Tragestelle des Personendosimeters.

ANMERKUNG 2 In diesem Nationalen Anhang werden die Tiefen-Personendosen durch Photonen- und Neutronenstrahlung kurz als Photonendosis und Neutronendosis bezeichnet.

ANMERKUNG 3 Ein Albedodosimeter besteht aus mindestens einem Thermolumineszenz-(TL-)Detektorpaar, das sich in einer speziellen Albedodosimeterkapselung befindet und das neben den Albedoneutronen auch thermische Neutronen des äußeren Strahlungsfeldes getrennt registriert. Zur Trennung der Photonen- und Neutronenmesswertanteile ist mindestens ein Detektorpaar erforderlich, das Neutronen- und Photonenstrahlung (NG-Detektor) und Photonenstrahlung (G-Detektor) nachweist.

ANMERKUNG 4 Im Folgenden werden die Albedodosimeter kurz Dosimeter genannt.

ANMERKUNG 5 Albedoneutronen sind Neutronen, die überwiegend nach elastischer Streuung an Wasserstoffkernen im Körper des Dosimeterträgers als thermische und mittelschnelle Neutronen aus der Körperoberfläche wieder austreten.

NC.3.2

Nulleffekt (bei Messungen mit Albedodosimetern)

Anzeige unbestrahlter Dosimeter

ANMERKUNG Diese nicht zusätzlich exponierten Dosimeter erhalten während der Messzeit eine Nulleffektdosis, z. B. durch die natürliche Umgebungsstrahlung. Die Anzeigen der zur Dosismessung im zu messenden Strahlungsfeld eingesetzten Dosimeter (Bruttomessung) werden mit den Nulleffektanzeigen der nicht exponierten Dosimeter verglichen, und der Nulleffekt wird abgezogen.

NC.4 Größen und Formelzeichen

$A_j(\text{G})$ unkorrigierte Anzeige des nur photonenempfindlichen TL-Detektors j der Charge (G)

ANMERKUNG 1 Ein photonenempfindlicher TL-Detektor ist ein G-Detektor nach DIN 6802-4. Als G-Detektoren werden üblicherweise ^7LiF -Detektoren (kurz ^7Li -Detektoren) benutzt.

$A_0(\text{G})$ mittlere unkorrigierte Nullanzeige der Referenzteilcharge (G) der nur photonenempfindlichen TL-Detektoren

$A_k(\text{NG})$ unkorrigierte Anzeige des neutronen- und photonenempfindlichen TL-Detektors (NG-Detektor) k der Charge (NG)

ANMERKUNG 2 Ein neutronen- und photonenempfindlicher TL-Detektor ist ein NG-Detektor nach DIN 6802-4. Als NG-Detektoren werden üblicherweise ^6LiF -Detektoren (kurz ^6Li -Detektoren) benutzt.

$A_0(\text{NG})$ mittlere unkorrigierte Nullanzeige der Referenzteilcharge (NG) der neutronen- und photonenempfindlichen TL-Detektoren

(G) Charge nur photonenempfindlicher TL-Detektoren

H_n durch Neutronenstrahlung erzeugte Komponente der Tiefen-Personendosis, kurz Neutronendosis

H_γ durch Photonenstrahlung erzeugte Komponente der Tiefen-Personendosis, kurz Photonendosis

k_F Korrektionsfaktor für Fading

k_j, k_k individueller Korrektionsfaktor für den j -ten bzw. k -ten Detektor

ANMERKUNG 3 Der j -te ^6Li - und der k -te ^7Li -Detektor bilden zusammen das betrachtete Dosimeter.

k_n Neutronenkorrektionsfaktor

$k_{n,E,\Phi}$ Korrektionsfaktor des ^6Li -Detektors zur Berücksichtigung der Einflüsse der Neutronenenergie E und des Strahleneinfallswinkels Φ

ANMERKUNG 4 Das Formelzeichen Φ darf nicht mit der Neutronenfluenz und der Funktion $\Phi(t)$ in Anhang E verwechselt werden.

$k_{n,\text{lin}}$ Korrektionsfaktor des ^6Li -Detektors für Nichtlinearität

k_{nr} chargenspezifischer Neutronenkorrektionsfaktor

$k_{\gamma,E,\Phi}$ Korrektionsfaktor des ^7Li -Detektors zur Berücksichtigung der Einflüsse der Photonenenergie E und des Strahleneinfallswinkels Φ

$k_{\gamma,\text{lin}}$ Korrektionsfaktor des ^7Li -Detektors für Nichtlinearität

$\dot{M}_{\text{nat}}$ Messwert eines ^7Li -Detektors durch die Umgebungsstrahlung in Einheiten der Dosisleistung, z. B. in Millisievert je Tag (mSv/d)

$M_{m,6}$ Dosisanzeige der ^6Li -Detektoren

$M_{m,7}$ Dosisanzeige der ^7Li -Detektoren

$M_{0,6}$ Dosisanzeige unbestrahlter ^6Li -Detektoren

$M_{0,7}$ Dosisanzeige unbestrahlter ^7Li -Detektoren

ANMERKUNG 5 Für die Dosisanzeigen $M_{m,6}$, $M_{m,7}$, $M_{0,6}$ und $M_{0,7}$ der ^6Li - und ^7Li -Detektoren werden die Einheiten der Dosis verwendet.

(NG) Charge neutronen- und photonenempfindlicher TL-Detektoren

$N_{\gamma,r}(n)$ Photonenkalibrierfaktor im Referenzfeld, ermittelt mit einer Teilcharge (n) der photonenempfindlichen Charge (G)

t_e Expositionsdauer eines Dosimeters

NC.5 Grundlagen

NC.5.1 Allgemeines

Zur Messung der Personendosis in Photonen- und Neutronenfeldern werden Thermolumineszenz-(TL-)Dosimetriesysteme in Form von Albedodosimetern eingesetzt. Sie ermöglichen die getrennte Bestimmung der Photonen- und Neutronendosis. In diesem Nationalen Anhang wird vorausgesetzt, dass es sich bei den verwendeten Dosimetern um Albedodosimeter nach DIN 6802-4 handelt.

Ein TL-Dosimetriesystem besteht aus einem Satz gleichartiger TL-Dosimetersonden zusammen mit dem Auslesegerät und dem Auswerteverfahren und den Behandlungsvorschriften. Auch die rechnerische Auswertung der Messdaten ist ein wesentlicher Teil des Messverfahrens. Näheres siehe NC.5.2 sowie die Literaturhinweise [NC1] und [NC2] in NC.8.

Es wird weiterhin davon ausgegangen, dass das TL-Dosimetriesystem in Voruntersuchungen (z. B. im Rahmen der Bauartprüfung) kalibriert wurde und die Kalibrierung und die damit zusammenhängenden Standardunsicherheiten im Rahmen von Qualitätssicherungsmaßnahmen regelmäßig geprüft werden.

NC.5.2 Modelle bei Messungen mit Albedodosimetern

Bei der rechnerischen Auswertung der Dosismessungen wird angenommen, dass die einzelnen Dosimeter im interessierenden Dosisbereich hinreichend linear anzeigen. Die Anzeige eines Dosimeters hängt also, mit Unsicherheit behaftet, linear mit der jeweils aufgetragenen Dosis zusammen.

Entsprechend DIN 6802-4 können für die Ermittlung der Photonendosis H_γ und der Neutronendosis H_n als Modelle der Auswertung die Gleichungen (NC.1) und (NC.2) angewendet werden:

$$H_\gamma = k_{\gamma,E,\Phi} \cdot [k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7}) - \dot{M}_{\text{nat}} \cdot t_e] \quad (\text{NC.1})$$

und

$$H_n = k_{n,E,\Phi} \cdot [k_{n,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,6} - M_{0,6}) - k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7})] \quad (\text{NC.2})$$

Eine Begründung der Modellfunktionen (NC.1) und (NC.2) ist in Abschnitt NC.7 gegeben.

In diesem nationalen Anhang werden die charakteristischen Grenzen bei Messungen der Photonendosis und der Neutronendosis im Rahmen der Personendosisüberwachung mit Albedodosimetern nach dem speziellen Modell der Gleichungen (NC.1) und (NC.2) dargestellt. Ein numerisches Beispiel ist in Abschnitt NC.6 aufgeführt.

Hier wird vorausgesetzt, dass im Rahmen der Kalibrierung des Dosimetriesystems alle Korrekturfaktoren und die Anzeige $\dot{M}_{\text{nat}} \cdot t_e$ durch die Umgebungsstrahlung während der Expositionsdauer t_e und die mit ihnen verbundenen Standardunsicherheiten bestimmt wurden.

NC.5.3 Anwendung auf die Photonendosis

NC.5.3.1 Ermittlung der Photonendosis und der zugehörigen Standardunsicherheit

Die Photonendosis H_γ ist mit dem Modell nach Gleichung (NC.1) zu ermitteln. Mit Gleichung (NC.1) und Gleichung (3) in 5.2.1 ergibt sich die Standardunsicherheit der Photonendosis $u(H_\gamma)$ zu:

$$\begin{aligned}
 u^2(H_\gamma) = & u^2(k_{\gamma,E,\Phi}) \cdot [k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7}) - \dot{M}_{\text{nat}} \cdot t_e]^2 \\
 & + u^2(k_{\gamma,\text{lin}}) \cdot [k_{\gamma,E,\Phi} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7})]^2 \\
 & + u^2(k_F) \cdot [k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot M_{m,7}]^2 \\
 & + u^2(M_{m,7}) \cdot [k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot k_F]^2 \\
 & + u^2(M_{0,7}) \cdot [-k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}}]^2 \\
 & + u^2(\dot{M}_{\text{nat}}) \cdot [-k_{\gamma,E,\Phi} \cdot t_e]^2 \\
 & + u^2(t_e) \cdot [-k_{\gamma,E,\Phi} \cdot \dot{M}_{\text{nat}}]^2
 \end{aligned} \tag{NC.3}$$

Die $M_{m,7}$ zugeordnete Standardunsicherheit $u(M_{m,7})$ ist nach DIN 6802-4 gegeben durch:

$$u^2(M_{m,7}) = u^2(M_{0,7}) + (B_7 \cdot M_{m,7})^2 \tag{NC.4}$$

mit dem Variationskoeffizienten B_7 , der im Rahmen der Bauartzulassung oder experimentell für große Dosiswerte von $M_{m,7}$ ermittelt wird, d. h. für $M_{m,7} \square M_{0,7}$.

Formal ist Gleichung (NC.3) von der Form

$$u^2(H_\gamma) = \sum_{l=1}^L c_l^2 \cdot u^2(x_l) = \sum_{l=1}^L u_l^2(H_\gamma) \tag{NC.5}$$

mit

$$u_l(H_\gamma) = c_l \cdot u(x_l) \quad \text{und} \quad L = 7 \tag{NC.6}$$

Die Sensitivitätskoeffizienten

$$c_l = \frac{\partial G}{\partial x_l} = \frac{\partial G}{\partial X_l} \bigg|_{X_1=x_1, \dots, X_L=x_L} \tag{NC.7}$$

sind die partiellen Ableitungen der Gleichung (NC.1). In Gleichung (NC.3) sind dies die Ausdrücke in eckigen Klammern. Der Vorteil, mit Sensitivitätskoeffizienten zu arbeiten, besteht darin, dass über die Ermittlung der $u_l(H_\gamma)$ die Beiträge der einzelnen Eingangsgrößen X_l zur Gesamtunsicherheit deutlich werden, wenn – wie hier – die Kovarianzen vernachlässigbar sind.

NC.5.3.2 Berechnung der Standardunsicherheit als Funktion der Messgröße $\tilde{H}_\gamma$

Ein wichtiger Zwischenschritt bei der Ermittlung der Erkennungs- und Nachweisgrenze ist die Bestimmung der Standardunsicherheit $\tilde{u}(\tilde{H}_\gamma)$ als Funktion des wahren Wertes $\tilde{H}_\gamma$ der Messgröße. In der Modellgleichung (NC.1) wird für H_γ der Parameter $\tilde{H}_\gamma$ eingesetzt und nach $M_{m,7}$ aufgelöst:

$$M_{m,7}(\tilde{H}_\gamma) = \frac{\tilde{H}_\gamma}{k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot k_F} + \frac{M_{0,7}}{k_F} + \frac{\dot{M}_{\text{nat}} \cdot t_e}{k_{\gamma,\text{lin}} \cdot k_F} \tag{NC.8}$$

$M_{m,7}(\tilde{H}_\gamma)$ nach Gleichung (NC.8) wird für $M_{m,7}$ in Gleichung (NC.3) und Gleichung (NC.4) eingesetzt und man erhält die Standardunsicherheit $\tilde{u}^2(\tilde{H}_\gamma)$ als Funktion des wahren Wertes $\tilde{H}_\gamma$.

NC.5.3.3 Erkennungsgrenze

Die Erkennungsgrenze ist nach Gleichung (21) in 6.2 und unter Berücksichtigung von NC.5.3.2:

$$H_\gamma^* = k_{1-\alpha} \cdot \tilde{u}(\tilde{H}_\gamma = 0) \quad (\text{NC.9})$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{u}^2(0) = & u^2(k_{\gamma,\text{lin}}) \cdot \left[\frac{k_{\gamma,E,\Phi} \cdot \dot{M}_{\text{nat}} \cdot t_e}{k_{\gamma,\text{lin}}} \right]^2 \\ & + u^2(k_F) \cdot \left[\frac{k_{\gamma,E,\Phi}}{k_F} \cdot (\dot{M}_{\text{nat}} \cdot t_e + k_{\gamma,\text{lin}} \cdot M_{0,7}) \right]^2 \\ & + (u^2(M_{0,7}) + (B_7 \cdot M_{m,7}(\tilde{H}_\gamma = 0))^2) \cdot \left[\frac{k_{\gamma,E,\Phi}}{k_{\gamma,\text{lin}} \cdot k_F} \right]^2 \\ & + u^2(M_{0,7}) \cdot \left[-k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \right]^2 \\ & + u^2(\dot{M}_{\text{nat}}) \cdot \left[-k_{\gamma,E,\Phi} \cdot t_e \right]^2 \\ & + u^2(t_e) \cdot \left[-k_{\gamma,E,\Phi} \cdot \dot{M}_{\text{nat}} \right]^2 \end{aligned} \quad (\text{NC.10})$$

Man erhält $M_{m,7}(\tilde{H}_\gamma = 0)$ nach (NC.8) durch Einsetzen von $\tilde{H}_\gamma = 0$.

Es ist zu beachten, dass die Erkennungsgrenze außer von den bei der Kalibrierung des Dosimetriesystems ermittelten Größen auch von der Dauer der Exposition des Albedodosimeters abhängt.

NC.5.3.4 Nachweisgrenze

Die Nachweisgrenze ist nach Gleichung (22) in 6.3 und unter Berücksichtigung von NC.5.3.2:

$$H_\gamma^\# = H_\gamma^* + k_{1-\beta} \cdot \tilde{u}(\tilde{H}_\gamma = H_\gamma^\#) \quad (\text{NC.11})$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{u}^2(\tilde{H}_\gamma) = & u^2(k_{\gamma,E,\Phi}) \cdot \left[k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,7}(\tilde{H}_\gamma) - M_{0,7}) - \dot{M}_{\text{nat}} \cdot t_e \right]^2 \\ & + u^2(k_{\gamma,\text{lin}}) \cdot \left[k_{\gamma,E,\Phi} \cdot (k_F \cdot M_{m,7}(\tilde{H}_\gamma) - M_{0,7}) \right]^2 \\ & + u^2(k_F) \cdot \left[k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot M_{m,7}(\tilde{H}_\gamma) \right]^2 \\ & + u^2(M_{m,7}(\tilde{H}_\gamma)) \cdot \left[k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot k_F \right]^2 \\ & + u^2(M_{0,7}) \cdot \left[-k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \right]^2 \\ & + u^2(\dot{M}_{\text{nat}}) \cdot \left[-k_{\gamma,E,\Phi} \cdot t_e \right]^2 \\ & + u^2(t_e) \cdot \left[-k_{\gamma,E,\Phi} \cdot \dot{M}_{\text{nat}} \right]^2 \end{aligned} \quad (\text{NC.12})$$

mit

$$M_{m,7}(\tilde{H}_\gamma) = \frac{\tilde{H}_\gamma}{k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot k_F} + \frac{M_{0,7}}{k_F} + \frac{\dot{M}_{\text{nat}} \cdot t_e}{k_{\gamma,\text{lin}} \cdot k_F} \quad (\text{NC.13})$$

und

$$u^2(M_{m,7}(\tilde{H}_\gamma)) = u^2(M_{0,7}) + (B_7 \cdot M_{m,7}(\tilde{H}_\gamma))^2 \quad (\text{NC.14})$$

Gleichung (NC.11) ist eine implizite Gleichung, die zweckmäßig mit dem Anfangswert $H_\gamma^\# = 2 \cdot H_\gamma^*$ iterativ gelöst werden kann. Diese Iteration ist fast immer konvergent, andernfalls ist das Messverfahren gänzlich ungeeignet.

NC.5.3.5 Grenzen des Vertrauensbereichs und bester Schätzwert

Die Vertrauensgrenzen $H_\gamma^\triangleleft$ und $H_\gamma^\triangleright$ werden nach den Gleichungen (29), (30) und (31) in 6.4 mit der Standardunsicherheit von H_γ nach Gleichung (NC.3) berechnet.

Der beste Schätzwert $\hat{H}_\gamma$ und die ihm zugeordnete Standardunsicherheit $u(\hat{H}_\gamma)$ werden nach den Gleichungen (33) und (34) in 6.5 mit der Standardunsicherheit von H_γ nach Gleichung (NC.3) berechnet.

NC.5.4 Anwendung auf die Neutronendosis

NC.5.4.1 Ermittlung der Neutronendosis und der zugehörigen Standardunsicherheit

Die Neutronendosis H_n ist mit dem Modell nach Gleichung (NC.2) zu ermitteln. Mit Gleichung (NC.2) und Gleichung (3) in Abschnitt 5.2.1 ergibt sich die Standardunsicherheit der Neutronendosis $u(H_n)$ zu:

$$\begin{aligned} u^2(H_n) = & u^2(k_{n,E,\Phi}) \cdot [k_{n,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,6} - M_{0,6}) - k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7})]^2 \\ & + u^2(k_{n,\text{lin}}) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot (k_F \cdot M_{m,6} - M_{0,6})]^2 \\ & + u^2(k_F) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot (k_{n,\text{lin}} \cdot M_{m,6} - k_{\gamma,\text{lin}} \cdot M_{m,7})]^2 \\ & + u^2(M_{m,6}) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot k_{n,\text{lin}} \cdot k_F]^2 \\ & + u^2(M_{0,6}) \cdot [-k_{n,E,\Phi} \cdot k_{n,\text{lin}}]^2 \\ & + u^2(k_{\gamma,\text{lin}}) \cdot [-k_{n,E,\Phi} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7})]^2 \\ & + u^2(M_{m,7}) \cdot [-k_{n,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot k_F]^2 \\ & + u^2(M_{0,7}) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}}]^2 \end{aligned} \quad (\text{NC.15})$$

Die $M_{m,6}$ zugeordnete Standardunsicherheit $u(M_{m,6})$ ist nach DIN 6802-4 gegeben durch:

$$u^2(M_{m,6}) = u^2(M_{0,6}) + (B_6 \cdot M_{m,6})^2 \quad (\text{NC.16})$$

mit dem Variationskoeffizienten B_6 , der im Rahmen der Bauartzulassung oder experimentell für große Dosiswerte von $M_{m,6}$ ermittelt wird, d. h. für $M_{m,6} \gg M_{0,6}$. Die Standardunsicherheit $u(M_{m,7})$ folgt aus Gleichung (NC.4).

Formal ist Gleichung (NC.15) von der Form

$$u^2(H_n) = \sum_{l=1}^L c_l^2 \cdot u^2(x_l) = \sum_{l=1}^L u_l^2(H_n) \quad (\text{NC.17})$$

mit

$$u_l(H_n) = c_l \cdot u(x_l) \quad \text{und} \quad L = 8 \quad (\text{NC.18})$$

Die Sensitivitätskoeffizienten

$$c_l = \frac{\partial G}{\partial x_l} = \frac{\partial G}{\partial X_l} \bigg|_{X_1=x_1, \dots, X_L=x_L} \quad (\text{NC.19})$$

sind die partiellen Ableitungen der Gleichung (NC.2). Es gelten entsprechend die Erläuterungen aus NC.5.3.1.

NC.5.4.2 Berechnung der Standardunsicherheit als Funktion der Messgröße $\tilde{H}_n$

Für die Ermittlung der Erkennungs- und Nachweisgrenze ist die Bestimmung der Standardunsicherheit $\tilde{u}(\tilde{H}_n)$ als Funktion des wahren Wertes $\tilde{H}_n$ der Messgröße erforderlich. In der Modellgleichung (NC.2) wird für H_n der Parameter $\tilde{H}_n$ eingesetzt und nach $M_{m,6}$ aufgelöst:

$$M_{m,6}(\tilde{H}_n) = \frac{\tilde{H}_n}{k_{n,E,\Phi} \cdot k_{n,\text{lin}} \cdot k_F} + \frac{k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7})}{k_{n,\text{lin}} \cdot k_F} + \frac{M_{0,6}}{k_F} \quad (\text{NC.20})$$

$M_{m,6}(\tilde{H}_n)$ nach Gleichung (NC.20) wird für $M_{m,6}$ in Gleichung (NC.15) und Gleichung (NC.16) eingesetzt und man erhält die Standardunsicherheit $\tilde{u}^2(\tilde{H}_n)$ als Funktion des wahren Wertes $\tilde{H}_n$.

NC.5.4.3 Erkennungsgrenze

Für Neutronen hängt die Erkennungsgrenze H_n^* auch vom Messwert H_γ bzw. $M_{m,7}$ der Photonendosis ab, da H_n als Differenz von der Anzeige eines ^6Li - und eines $^6\text{Li-TL}$ -Detektors berechnet werden muss.

Die Erkennungsgrenze ist nach Gleichung (21) aus 6.2 und unter Berücksichtigung von NC.5.4.2:

$$H_n^* = k_{1-\alpha} \cdot \tilde{u}(\tilde{H}_n = 0) \quad (\text{NC.21})$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{u}^2(0) = & u^2(k_{n,\text{lin}}) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot (k_F \cdot M_{m,6}(\tilde{H}_n = 0) - M_{0,6})]^2 \\ & + u^2(k_F) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot (k_{n,\text{lin}} \cdot M_{m,6}(\tilde{H}_n = 0) - k_{\gamma,\text{lin}} \cdot M_{m,7})]^2 \\ & + u^2(M_{m,6}(\tilde{H}_n = 0)) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot k_{n,\text{lin}} \cdot k_F]^2 \\ & + u^2(M_{0,6}) \cdot [-k_{n,E,\Phi} \cdot k_{n,\text{lin}}]^2 \\ & + u^2(k_{\gamma,\text{lin}}) \cdot [-k_{n,E,\Phi} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7})]^2 \\ & + u^2(M_{m,7}) \cdot [-k_{n,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot k_F]^2 \\ & + u^2(M_{0,7}) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}}]^2 \end{aligned} \quad (\text{NC.22})$$

Man erhält $M_{m,6}(\tilde{H}_n = 0)$ nach Gleichung (NC.20) durch Einsetzen von $\tilde{H}_n = 0$ und $u(M_{m,6}(\tilde{H}_n = 0))$ nach Gleichung (NC.16) durch Einsetzen von $M_{m,6}(\tilde{H}_n = 0)$.

NC.5.4.4 Nachweisgrenze

Die Nachweisgrenze ist nach Gleichung (22) aus 6.3 und mit der Erkennungsgrenze nach Gleichung (NC.21) unter Berücksichtigung von NC.5.4.2

$$H_n^\# = H_n^* + k_{1-\beta} \cdot \tilde{u}(\tilde{H}_n = H_n^\#) \quad (\text{NC.23})$$

$$\begin{aligned}
\tilde{u}^2(\tilde{H}_n) = & u^2(k_{n,E,\Phi}) \cdot [k_{n,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,6}(\tilde{H}_n) - M_{0,6}) - k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7})]^2 \\
& + u^2(k_{n,\text{lin}}) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot (k_F \cdot M_{m,6}(\tilde{H}_n) - M_{0,6})]^2 \\
& + u^2(k_F) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot (k_{n,\text{lin}} \cdot M_{m,6}(\tilde{H}_n) - k_{\gamma,\text{lin}} \cdot M_{m,7})]^2 \\
& + u^2(M_{m,6}(\tilde{H}_n)) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot k_{n,\text{lin}} \cdot k_F]^2 \\
& + u^2(M_{0,6}) \cdot [-k_{n,E,\Phi} \cdot k_{n,\text{lin}}]^2 \\
& + u^2(k_{\gamma,\text{lin}}) \cdot [-k_{n,E,\Phi} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7})]^2 \\
& + u^2(M_{m,7}) \cdot [-k_{n,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot k_F]^2 \\
& + u^2(M_{0,7}) \cdot [k_{n,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}}]^2
\end{aligned} \tag{NC.24}$$

mit

$$M_{m,6}(\tilde{H}_n) = \frac{1}{k_F} \cdot \left(\frac{\tilde{H}_n / k_{n,E,\Phi} + k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7})}{k_{n,\text{lin}}} \cdot M_{0,6} \right) \tag{NC.25}$$

und

$$u^2(M_{m,6}(\tilde{H}_n)) = u^2(M_{0,6}) + (B_6 \cdot M_{m,6}(\tilde{H}_n))^2 \tag{NC.26}$$

Gleichung (NC.23) ist eine implizite Gleichung, die zweckmäßig mit dem Anfangswert $H_n^\# = 2 \cdot H_n^*$ iterativ gelöst werden kann. Diese Iteration ist fast immer konvergent, andernfalls ist das Messverfahren gänzlich ungeeignet.

NC.5.4.5 Grenzen des Vertrauensbereichs und bester Schätzwert

Die Vertrauensgrenzen $H_n^\triangleleft$ und $H_n^\triangleright$ werden nach den Gleichungen (29), (30) und (31) in 6.4 mit der Standardunsicherheit von H_n nach Gleichung (NC.15) berechnet.

Der beste Schätzwert $\hat{H}_n$ und die ihm zugeordnete Standardunsicherheit $u(\hat{H}_n)$ werden nach den Gleichungen (33) und (34) in 6.5 mit der Standardunsicherheit von H_n nach Gleichung (NC.15) berechnet.

NC.6 Anwendungsbeispiel zur Personendosimetrie mit Albedodosimetern

NC.6.1 Allgemeines

Zur Verdeutlichung der Anwendung dieser Norm wird ein numerisches Beispiel zur Ermittlung von H_γ und H_n sowie die Berechnung der charakteristischen Grenzen gegeben. Dabei werden Albedodosimeter mit dem Modell der Auswertung der Gleichungen (NC.1) und (NC.2) benutzt. Es gelten die Vorgaben aus Tabelle NC.1.

ANMERKUNG Um ein Nachvollziehen der Zwischenrechnungen zu ermöglichen, werden die Zwischenergebnisse mit einer größeren Anzahl von Dezimalstellen angegeben als dies in der Praxis für Endergebnisse sinnvoll ist. Die letzte Stelle kann gerundet sein.

Tabelle NC.1 – Angenommene Werte und Standardunsicherheiten der Eingangsgrößen bei der Ermittlung von H_γ und H_n mittels Albedodosimetern im Beispiel NC.6

Dosimeter	Eingangsgröße	Wert	Standardunsicherheit	Einheit
	t_e	60	4	d
	$\dot{M}_{\text{nat}}$	2	0,1	$\mu\text{Sv/d}$
	k_F	1,1	0,1	
^7Li	$M_{m,7}$	190	8,588	μSv
	$k_{\gamma,E,\Phi}$	1	0,12	
	$k_{\gamma,\text{lin}}$	1	0,058	
	$M_{0,7}$	25	4	μSv
	B_7	0,04		
^6Li	$M_{m,6}$	300	12,649	μSv
	$k_{n,E,\Phi}$	1,2	0,35	
	$k_{n,\text{lin}}$	1	0,058	
	$M_{0,6}$	25	4	μSv
	B_6	0,04		

NC.6.2 Ermittlung der charakteristischen Grenzen der Photonendosis

Zur Ermittlung der Photonendosis wird das Modell nach Gleichung (NC.1) in NC.5.2 herangezogen:

$$H_\gamma = k_{\gamma,E,\Phi} \cdot \left[k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7}) - \dot{M}_{\text{nat}} \cdot t_e \right] \quad (\text{NC.27})$$

Mit Gleichung (NC.27) und den Werten aus Tabelle NC.1 ergibt sich eine Photonendosis

$$H_\gamma = 1 \cdot \left[1 \cdot (1,1 \cdot 190 \mu\text{Sv} - 25 \mu\text{Sv}) - 2 \cdot 60 \mu\text{Sv} \right] = 64,0 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.28})$$

und mit Gleichung (NC.3) aus NC.5.3.1 die zugeordnete Varianz und Standardunsicherheit:

$$u^2(H_\gamma) = 739,1 \mu\text{Sv}^2 \quad (\text{NC.29})$$

$$u(H_\gamma) = 27,19 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.30})$$

Das zugehörige Unsicherheitsbudget ist in Tabelle NC.2 gegeben.

Tabelle NC.2 – Unsicherheitsbudget der Photonendosis zum Messwert H_γ

	Größe	Wert	Standardmess- unsicherheit	Sensitivitäts- koeffizient	Unsicher- heitsbeitrag
1	t_e	60 d	4 d	$-2,0 \mu\text{Sv/d}$	$8,0 \mu\text{Sv}$
2	$\dot{M}_{\text{nat}}$	$2 \mu\text{Sv/d}$	$0,1 \mu\text{Sv/d}$	$-60,0 \text{ d}$	$6,0 \mu\text{Sv}$
3	$M_{\text{m},7}$	$190 \mu\text{Sv}$	$8,588 \mu\text{Sv}$	1,1	$9,447 \mu\text{Sv}$
4	$k_{\gamma,E,\Phi}$	1	0,12	$64,0 \mu\text{Sv}$	$7,68 \mu\text{Sv}$
5	$k_{\gamma,\text{lin}}$	1	0,058	$184,0 \mu\text{Sv}$	$10,67 \mu\text{Sv}$
6	k_F	1,1	0,1	$190,0 \mu\text{Sv}$	$19,0 \mu\text{Sv}$
7	$M_{0,7}$	$25 \mu\text{Sv}$	$4 \mu\text{Sv}$	$-1,0$	$4,0 \mu\text{Sv}$
	H_γ	$64,0 \mu\text{Sv}$	Gesamtunsicherheit: $u(H_\gamma) = 27,19 \mu\text{Sv}^*)$		

*) Wurzel aus der Quadratsumme der Unsicherheitsbeiträge.

Dabei seien bis auf $M_{\text{m},7}$ alle Eingangsgrößen mit ihren zugeordneten Standardunsicherheiten im Rahmen der Kalibrierung des Dosimetriesystems und sonstiger qualitätssichernder Maßnahmen vorab ermittelt oder festgelegt worden und somit bekannt. Die Zahlenwerte dieser Größen sowie die aktuellen Werte der Dosisanzeige, der Expositionsdauer und ihrer aufgrund von Transport- und Lagerzeiten angenommenen Standardunsicherheiten sind in Tabelle NC.1 angegeben. Vorab wurden die Wahrscheinlichkeiten $\alpha = \beta = 0,05$ und $1 - \gamma = 0,95$ festgelegt.

Die Erkennungsgrenze wird nach Gleichung (NC.9) mit der Festlegung der Gleichung (NC.10) berechnet. Mit den Daten aus Tabelle NC.1 ergibt sich die Erkennungsgrenze:

$$H_\gamma^* = k_{1-\alpha} \cdot \tilde{u}(0) = 1,645 \cdot 19,78 \mu\text{Sv} = 32,54 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.31})$$

Tabelle NC.3 zeigt das entsprechende Unsicherheitsbudget für $\tilde{u}(0)$.

Die Erkennungsgrenze ist außer von den bei der Kalibrierung des Dosimetersystems ermittelten Größen auch von der Expositionsdauer t_e und deren Unsicherheit abhängig.

Tabelle NC.3 – Unsicherheitsbudget der Photonendosis an der Erkennungsgrenze H_γ^*

	Größe	Wert	Standardmess- unsicherheit	Sensitivitäts- koeffizient	Unsicher- heitsbeitrag
1	t_e	60 d	4 d	$-2,0 \mu\text{Sv/d}$	$8,0 \mu\text{Sv}$
2	$\dot{M}_{\text{nat}}$	$2 \mu\text{Sv/d}$	$0,1 \mu\text{Sv/d}$	$-60,0 \text{ d}$	$6,0 \mu\text{Sv}$
3	$M_{\text{m},7}$	$131,8 \mu\text{Sv}$	$6,618 \mu\text{Sv}$	1,1	$7,28 \mu\text{Sv}$
4	$k_{\gamma,E,\Phi}$	1	0,12	$0 \mu\text{Sv}$	$0 \mu\text{Sv}$
5	$k_{\gamma,\text{lin}}$	1	0,058	$120,0 \mu\text{Sv}$	$6,96 \mu\text{Sv}$
6	k_F	1,1	0,1	$131,82 \mu\text{Sv}$	$13,18 \mu\text{Sv}$
7	$M_{0,7}$	$25 \mu\text{Sv}$	$4 \mu\text{Sv}$	$-1,0$	$4,0 \mu\text{Sv}$
	$\tilde{H}_\gamma$	$0 \mu\text{Sv}$	Gesamtunsicherheit: $\tilde{u}(0) = 19,78 \mu\text{Sv}^*)$		

*) Wurzel aus der Quadratsumme der Unsicherheitsbeiträge

Die Nachweisgrenze wird nach Gleichung (NC.11) mit der Erkennungsgrenze nach Gleichung (NC.9) und den Festlegungen der Gleichungen (NC.12), (NC.13) und (NC.14) berechnet. Die implizite Gleichung (NC.11) wird durch Iteration gelöst. Als Anfangswert für die Iteration wird $H_\gamma^\# = 2 \cdot H_\gamma^* = 65,08 \mu\text{Sv}$ gewählt. Das Verfahren konvergiert, mit den Daten aus Tabelle NC.4 ist die Lösung im nachfolgenden Unsicherheitsbudget in Tabelle NC.4 angegeben.

Die Nachweisgrenze ist dann:

$$H_\gamma^\# = H_\gamma^* + k_{1-\beta} \cdot \tilde{u}(H_\gamma^\#) = 32,54 \mu\text{Sv} + 1,645 \cdot 29,50 \mu\text{Sv} = 81,06 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.32})$$

Die Nachweisgrenze ist mit dem Richtwert aus rechtlichen oder sonstigen Vorgaben zu vergleichen. Ist die Nachweisgrenze kleiner als der Richtwert, ist das Verfahren zur Bestimmung der Photonendosis in der Personendosimetrie geeignet.

Da H_γ mit $64,0 \mu\text{Sv}$ für das exponierte Dosimeter größer ist als die Erkennungsgrenze von $32,5 \mu\text{Sv}$, ist eine Photonendosis größer null erkannt worden.

Die anzugebenden Vertrauensgrenzen $H_\gamma^\triangleleft$ und $H_\gamma^\triangleright$ der Photonendosis werden zur Wahrscheinlichkeit $1 - \gamma = 0,95$ für den erhaltenen Wert der Photonendosis $H_\gamma = 64,0 \mu\text{Sv}$ mit der zugeordneten Standardunsicherheit $u(H_\gamma) = 27,2 \mu\text{Sv}$ berechnet (siehe NC.5.3.5). Aus der Standardnormalverteilung ergeben sich die Parameter

$$\omega = \Phi(H_\gamma / u(H_\gamma)) = \Phi(64,0 / 27,19) = \Phi(2,354) = 0,9907 \quad (\text{NC.33})$$

und

$$p = \omega \cdot (1 - \frac{\gamma}{2}) = 0,9907 \cdot (1 - \frac{0,05}{2}) = 0,9659 \Rightarrow k_p = 1,824 \quad (\text{NC.34})$$

sowie

$$q = 1 - \omega \cdot \frac{\gamma}{2} = 1 - 0,9907 \cdot \frac{0,05}{2} = 0,9752 \Rightarrow k_q = 1,964 \quad (\text{NC.35})$$

Tabelle NC.4 – Unsicherheitsbudget der Photonendosis an der Nachweisgrenze $H_\gamma^\#$

	Größe	Wert	Standardmess- unsicherheit	Sensitivitäts- koeffizient	Unsicher- heitsbeitrag
1	t_e	60 d	4 d	$-2,0 \mu\text{Sv/d}$	$8,0 \mu\text{Sv}$
2	$\dot{M}_{\text{nat}}$	$2 \mu\text{Sv/d}$	$0,1 \mu\text{Sv/d}$	$-60,0 \text{ d}$	$6,0 \mu\text{Sv}$
3	$M_{\text{m},7}$	$205,5 \mu\text{Sv}$	$9,142 \mu\text{Sv}$	1,1	$10,06 \mu\text{Sv}$
4	$k_{\gamma,E,\Phi}$	1	0,12	$81,06 \mu\text{Sv}$	$9,727 \mu\text{Sv}$
5	$k_{\gamma,\text{lin}}$	1	0,058	$201,1 \mu\text{Sv}$	$11,66 \mu\text{Sv}$
6	k_F	1,1	0,1	$205,5 \mu\text{Sv}$	$20,55 \mu\text{Sv}$
7	$M_{0,7}$	$25 \mu\text{Sv}$	$4 \mu\text{Sv}$	$-1,0$	$4,0 \mu\text{Sv}$
	$H_\gamma^\#$	$81,058 \mu\text{Sv}$	Gesamtunsicherheit $\tilde{u}(H_\gamma^\#) = 29,50 \mu\text{Sv}^*)$		

*) Wurzel aus der Quadratsumme der Unsicherheitsbeiträge.

Damit sind die Vertrauensgrenzen:

$$H_\gamma^\triangleright = H_\gamma - k_p \cdot u(H_\gamma) = 64,0 \mu\text{Sv} - 1,824 \cdot 27,19 \mu\text{Sv} = 14,40 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.36})$$

$$H_\gamma^\triangleleft = H_\gamma + k_q \cdot u(H_\gamma) = 64,0 \mu\text{Sv} + 1,964 \cdot 27,19 \mu\text{Sv} = 117,4 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.37})$$

Berechnung des besten Schätzwertes für die Photonendosis:

$$\begin{aligned} \hat{H}_\gamma &= H_\gamma + \frac{u(H_\gamma)}{\omega\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{H_\gamma^2}{2u^2(H_\gamma)}\right) \\ &= 64,0 \mu\text{Sv} + \frac{27,19 \mu\text{Sv}}{0,9907 \cdot \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{64,0^2 \mu\text{Sv}^2}{2 \cdot 27,19^2 \mu\text{Sv}^2}\right) = 64,69 \mu\text{Sv} \end{aligned} \quad (\text{NC.38})$$

Die zugehörige Standardunsicherheit ist:

$$\begin{aligned} u(\hat{H}_\gamma) &= \sqrt{u^2(H_\gamma) - (\hat{H}_\gamma - H_\gamma) \cdot \hat{H}_\gamma} \\ &= \sqrt{27,19^2 \mu\text{Sv}^2 - (64,69 \mu\text{Sv} - 64,0 \mu\text{Sv}) \cdot 64,69 \mu\text{Sv}} = 26,36 \mu\text{Sv} \end{aligned} \quad (\text{NC.39})$$

NC.6.3 Ermittlung der charakteristischen Grenzen der Neutronendosis

Zur Ermittlung der Neutronendosis wird das Modell nach Gleichung (NC.2) in NC.5.2 herangezogen:

$$H_n = k_{n,E,\Phi} \cdot \left[k_{n,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{\text{m},6} - M_{0,6}) - k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{\text{m},7} - M_{0,7}) \right] \quad (\text{NC.40})$$

Mit Gleichung (NC.40) und den Werten aus Tabelle NC.1 ergibt sich eine Neutronendosis

$$H_n = 1,2 \cdot [1 \cdot (1,1 \cdot 300 - 25) - 1 \cdot (1,1 \cdot 190 - 25)] \mu\text{Sv} = 145,2 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.41})$$

und mit Gleichung (NC.15) in NC.5.4.1 die zugeordnete Varianz und Standardunsicherheit:

$$u^2(H_n) = 3\,036 \mu\text{Sv}^2 \quad (\text{NC.42})$$

$$u(H_n) = 55,10 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.43})$$

Das zugehörige Unsicherheitsbudget ist:

Tabelle NC.5 – Unsicherheitsbudget der Neutronendosis zum Messwert H_n

	Größe	Wert	Standardmess- unsicherheit	Sensitivitäts- koeffizient	Unsicher- heitsbeitrag
1	$M_{m,7}$	190 μSv	8,588 μSv	-1,32	11,34 μSv
2	$k_{\gamma,\text{lin}}$	1	0,058	-220,8 μSv	12,81 μSv
3	$M_{0,7}$	25 μSv	4 μSv	1,2	4,80 μSv
4	$M_{m,6}$	300 μSv	12,65 μSv	1,32	16,70 μSv
5	$k_{n,E,\Phi}$	1,2	0,35	121,0 μSv	42,35 μSv
6	$k_{n,\text{lin}}$	1	0,058	366,0 μSv	21,23 μSv
7	k_F	1,1	0,1	132,0 μSv	13,20 μSv
8	$M_{0,6}$	25 μSv	4 μSv	-1,2	4,80 μSv
	H_n	145,2 μSv	Gesamtunsicherheit: $u(H_n) = 55,10 \mu\text{Sv}^*)$		

^{*)} Wurzel aus der Quadratsumme der Unsicherheitsbeiträge.

Für dieses Beispiel seien bis auf $M_{m,7}$ und $M_{m,6}$ alle Eingangsgrößen mit ihren zugeordneten Standardunsicherheiten im Rahmen der Kalibrierung des Dosimetriesystems und sonstiger qualitätssichernder Maßnahmen vorab ermittelt oder festgelegt worden und somit bekannt. Die Zahlenwerte dieser Größen sowie die aktuellen Werte der Dosisanzeigen, der Expositionszeit und ihrer aufgrund von Transport- und Lagerzeiten angenommenen Unsicherheit sind in Tabelle NC.1 angegeben. Vorab wurden die Wahrscheinlichkeiten $\alpha = \beta = 0,05$ und $1 - \gamma = 0,95$ festgelegt.

Die Erkennungsgrenze wird nach Gleichung (NC.21) mit der Festlegung der Gleichungen (NC.22) berechnet. Es sollte beachtet werden, dass die Erkennungsgrenze für die Neutronendosis von der Photonendosis bzw. von der Dosisanzeige $M_{m,7}$ der Photonendosis abhängt. Mit den Daten aus Tabelle NC.1 ergibt sich die Erkennungsgrenze:

$$H_n^*(H_\gamma = 64,0 \mu\text{Sv}) = k_{1-\alpha} \cdot \tilde{u}(\tilde{H}_n = 0) = 1,645 \cdot 25,12 \mu\text{Sv} = 41,33 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.44})$$

Tabelle NC.6 zeigt das entsprechende Unsicherheitsbudget für $\tilde{u}(0)$.

Tabelle NC.6 – Unsicherheitsbudget der Neutronendosis an der Erkennungsgrenze H_n^*

	Größe	Wert	Standardmess- unsicherheit	Sensitivitäts- koeffizient	Unsicher- heitsbeitrag
1	$M_{m,7}$	190 μSv	8,588 μSv	-1,32	11,34 μSv
2	$k_{\gamma,\text{lin}}$	1	0,058	-220,8 μSv	12,81 μSv
3	$M_{0,7}$	25 μSv	4 μSv	1,2	4,8 μSv
4	$M_{m,6}$	190 μSv	8,588 μSv	1,32	11,34 μSv
5	$k_{n,E,\Phi}$	1,2	0,35	0 μSv	0 μSv
6	$k_{n,\text{lin}}$	1	0,058	220,8 μSv	12,81 μSv
7	k_F	1,1	0,1	0 μSv	0 μSv
8	$M_{0,6}$	25 μSv	4 μSv	-1,2	4,8 μSv
	$\tilde{H}_n$	0 μSv	Gesamtunsicherheit: $\tilde{u}(0) = 25,12 \mu\text{Sv}^*)$		

*) Wurzel aus der Quadratsumme der Unsicherheitsbeiträge.

ANMERKUNG 1 In einem reinen Neutronenfeld (also $H_\gamma = 0$) erreicht die Erkennungsgrenze der Neutronendosis ihr Minimum:

$$H_n^*(H_\gamma = 0 \mu\text{Sv}) = k_{1-\alpha} \cdot \tilde{u}(0) = 1,645 \cdot 18,03 \mu\text{Sv} = 29,66 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.45})$$

ANMERKUNG 2 Die Erkennungsgrenze der Neutronendosis hängt nicht explizit von der Expositionsdauer des Albedodosimeters ab, sondern nur implizit über die akkumulierte Photonendosis.

Die Nachweisgrenze wird nach Gleichung (NC.23) mit der Erkennungsgrenze nach Gleichung (NC.21) und den Festlegungen der Gleichungen (NC.24), (NC.25) und (NC.26) berechnet. Die implizite Gleichung (NC.23) wird durch Iteration gelöst. Als Anfangswert für die Iteration wird $H_n^\# = 2 \cdot H_n^* = 82,66 \mu\text{Sv}$ gewählt. Es sollte beachtet werden, dass die Nachweisgrenze für die Neutronendosis von der Photonendosis bzw. von der Dosisanzeige $M_{m,7}$ der Photonendosis abhängt. Das Verfahren konvergiert. Mit den Daten aus Tabelle NC.1 ist die Lösung im nachfolgenden Unsicherheitsbudget angegeben.

Tabelle NC.7 – Unsicherheitsbudget der Neutronendosis an der Nachweisgrenze $H_n^\#$

	Größe	Wert	Standardmess- unsicherheit	Sensitivitäts- koeffizient	Unsicher- heitsbeitrag
1	$M_{m,7}$	190 μSv	8,588 μSv	-1,32	11,34 μSv
2	$k_{\gamma,\text{lin}}$	1	0,058	-220,8 μSv	12,81 μSv
3	$M_{0,7}$	25 μSv	4 μSv	1,2	4,8 μSv
4	$M_{m,6}$	281,7 μSv	11,96 μSv	1,32	15,78 μSv
5	$k_{n,E,\Phi}$	1,2	0,35	100,87 μSv	35,30 μSv
6	$k_{n,\text{lin}}$	1	0,058	341,84 μSv	19,83 μSv
7	k_F	1,1	0,1	110,0 μSv	11,0 μSv
8	$M_{0,6}$	25 μSv	4 μSv	-1,2	4,8 μSv
	$H_n^\#$	121,0 μSv	Gesamtunsicherheit: $\tilde{u}(H_n^\#) = 48,46 \mu\text{Sv}^*)$		

^{*)} Wurzel aus der Quadratsumme der Unsicherheitsbeiträge

Die Nachweisgrenze ist dann

$$H_n^\# = H_n^* + k_{1-\beta} \cdot \tilde{u}(H_n^\#) = 41,33 \mu\text{Sv} + 1,645 \cdot 48,46 \mu\text{Sv} = 121,0 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.46})$$

Die Nachweisgrenze ist mit dem Richtwert aus rechtlichen oder sonstigen Vorgaben zu vergleichen. Ist die Nachweisgrenze kleiner als der Richtwert, ist das Verfahren zur Bestimmung der Neutronendosis in der Personendosimetrie geeignet.

Da H_n mit 145 μSv für das exponierte Albedodosimeter größer ist als die Erkennungsgrenze von 41,3 μSv , ist eine Neutronendosis größer null erkannt worden.

Die anzugebenden Vertrauensgrenzen $H_n^<$ und $H_n^>$ der Neutronendosis werden zur Wahrscheinlichkeit $1 - \gamma = 0,95$ für den erhaltenen Wert der Neutronendosis $H_n = 145 \mu\text{Sv}$ mit der zugeordneten Standardunsicherheit $u(H_n) = 55,1 \mu\text{Sv}$ berechnet (siehe NC.5.4.5). Aus der Standardnormalverteilung ergeben sich die Parameter

$$\begin{aligned} \omega &= \Phi(H_n / u(H_n)) = \Phi(145,2 / 55,10) = \Phi(2,635) = 0,995\,8 \\ p &= \omega \cdot \left(1 - \frac{\gamma}{2}\right) = 0,995\,8 \cdot \left(1 - \frac{0,05}{2}\right) = 0,970\,9 \Rightarrow k_p = 1,894 \\ q &= 1 - \omega \cdot \frac{\gamma}{2} = 1 - 0,995\,8 \cdot \frac{0,05}{2} = 0,975\,1 \Rightarrow k_q = 1,962 \end{aligned} \quad (\text{NC.47})$$

Damit sind die Vertrauensgrenzen:

$$H_n^< = H_n - k_p \cdot u(H_n) = 145,2 \mu\text{Sv} - 1,894 \cdot 55,10 \mu\text{Sv} = 40,83 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.48})$$

$$H_n^> = H_n + k_q \cdot u(H_n) = 145,2 \mu\text{Sv} + 1,962 \cdot 55,10 \mu\text{Sv} = 253,3 \mu\text{Sv} \quad (\text{NC.49})$$

Berechnung des besten Schätzwertes für die Neutronendosis:

$$\begin{aligned}\hat{H}_n &= H_n + \frac{u(H_n)}{\omega\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{H_n^2}{2u^2(H_n)}\right) \\ &= 145,2 \mu\text{Sv} + \frac{55,10 \mu\text{Sv}}{0,9958 \cdot \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{145,2^2 \mu\text{Sv}^2}{2 \cdot 55,10^2 \mu\text{Sv}^2}\right) = 145,9 \mu\text{Sv}\end{aligned}\quad (\text{NC.50})$$

Die zugehörige Standardunsicherheit ist:

$$\begin{aligned}u(\hat{H}_n) &= \sqrt{u^2(H_n) - (\hat{H}_n - H_n) \cdot \hat{H}_n} \\ &= \sqrt{55,10^2 \mu\text{Sv}^2 - (145,9 \mu\text{Sv} - 145,2 \mu\text{Sv}) \cdot 145,9 \mu\text{Sv}} = 54,18 \mu\text{Sv}\end{aligned}\quad (\text{NC.51})$$

NC.7 Erläuterungen zu den Modellen bei Messungen mit Albedodosimetern

Da die Modellfunktionen (NC.1) und (NC.2) in NC.5.2 nicht unmittelbar aus der DIN 6802-4 ersichtlich sind, wird in diesem Anhang die Begründung für diese Modellfunktionen gegeben.

Nach DIN 6802-4 ergibt sich unter Ersetzung der individuellen unkorrigierten Nullanzeige $A_{0j}(\text{G})$ des Detektors j durch die mittlere unkorrigierte Nullanzeige $A_0(\text{G})$ der Charge (G):

$$H_\gamma = N_{\gamma,r}(n) \cdot k_j [A_j(\text{G}) - A_0(\text{G})] \quad (\text{NC.52})$$

Beim Einsatz des Albedodosimeters ist nicht immer mit Strahleneinfall überwiegend aus einer Richtung zu rechnen. Deshalb wird hier über DIN 6802-4 hinausgehend ein Richtungskorrektionsfaktor k_Φ eingeführt:

Richtungs- und Energieabhängigkeit von Dosimetern sind eng miteinander verknüpft. Für Photonen ist der Korrektionsfaktor $k_{\gamma,E,\Phi}$ für Energie und Richtung der Quotient des Kalibrierfaktors $N_\gamma(E,\Phi)$ für ein Strahlungsfeld der Photonenenergie E , mit den Einfallswinkel Φ und dem Photonenkalibrierfaktor $N_{\gamma,r}(n)$ unter Referenzbedingungen:

$$k_{\gamma,E,\Phi} = \frac{N_\gamma(E,\Phi)}{N_{\gamma,r}(n)} \quad (\text{NC.53})$$

Da hier insbesondere sehr kleine Dosiswerte gemessen werden sollen, berücksichtigt der Korrektionsfaktor $k_{\gamma,\text{lin}}$ eventuelle Unterschiede des Kalibrierfaktors bei kleinen Dosen im Vergleich zum Photonenkalibrierfaktor $N_{\gamma,r}(n)$, der mit der Referenzdosis $H_{\gamma,\rho}$ ermittelt wird (siehe DIN 25483:2000-09 Gleichung (6)). Das Fadingverhalten der LiF-Detektoren wird durch einen Korrektionsfaktor k_F berücksichtigt.

$$\begin{aligned}\hat{H}_\gamma &= k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot k_j \cdot N_{\gamma,r}(n) \cdot [k_F \cdot A_j(\text{G}) - A_0(\text{G})] \\ &= k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot [k_F \cdot k_j \cdot N_{\gamma,r}(n) \cdot A_j(\text{G}) - k_j \cdot N_{\gamma,r}(n) \cdot A_0(\text{G})] \\ &= k_{\gamma,E,\Phi} \cdot k_{\gamma,\text{lin}} \cdot [k_F \cdot M_j(\text{G}) - M_0(\text{G})]\end{aligned}\quad (\text{NC.54})$$

In Gleichung (NC.54) wird abweichend von DIN 6802-4 mit M ein teilkorrigierter Dosiswert zur Anzeige A festgelegt:

$$M = k_j \cdot N_{\gamma,r}(n) \cdot A \quad (\text{NC.55})$$

Als neutronen- und photonenempfindliche Detektoren werden üblicherweise ^6LiF -Detektoren, als photonenempfindliche Detektoren ^7LiF -Detektoren verwendet. Deshalb wird (NG) durch den Index 6 und (G) durch den Index 7 ersetzt.

Bei Festkörperdosimetern wird die natürliche Strahlung von der Regenerierung bis zur Auswertung während der Expositionsdauer t_e aufintegriert. Die Anzeige der NG- und G-Detektoren wird täglich um einen Wert entsprechend einer Photonendosis von etwa $2 \mu\text{Sv}$ erhöht. Dieser Anteil der natürlichen Strahlung, der nach Strahlenschutzverordnung nicht zur beruflichen Strahlenexposition beiträgt, muss subtrahiert werden. Die Dosisleistung $\dot{M}_{\text{nat}}$ der natürlichen Strahlung wird mit dem gleichen Albedo-Dosimetriesystem gemessen.

Als endgültige Gleichung zur Ermittlung der Photonendosis ergibt sich dann aus Gleichung (NC.54):

$$H_\gamma = k_{\gamma,E,\Phi} \cdot [k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7}) - \dot{M}_{\text{nat}} \cdot t_e] \quad (\text{NC.56})$$

ANMERKUNG In DIN 6802-4 werden die Detektoren durch die Zugehörigkeit zu einer Charge (G) photonenempfindlicher Detektoren oder zu einer Charge (NG) neutronen- und photonenempfindlicher Detektoren und jeweils einer Detektornummer definiert. Systembedingt ist es möglich, dass Detektoren durch eine Detektorkartennummer und Detektorposition definiert werden.

Nach den Gleichungen (A.1) und (B.8) in DIN 6802-4:1998-04 ergibt sich unter Ersetzung der individuellen unkorrigierten Nullanzeigen A_{0k} (NG) und A_{0j} (G) der Detektoren j und k durch die mittlere unkorrigierte Nullanzeige A_0 (NG) und A_0 (G) der Chargen (NG) und (G):

$$H_n = k_n \cdot k_{nr} \cdot N_{\gamma,r}(n) \cdot [k_k \cdot (A_k(\text{NG}) - A_0(\text{NG})) - k_j \cdot (A_j(\text{G}) - A_0(\text{G}))] \quad (\text{NC.57})$$

Mit Hilfe der Korrekturfaktoren k_n und k_{nr} kann der Neutronenkalibrierfaktor N_n für das Strahlungsfeld beim Anwender auf den Photonenkalibrierfaktor $N_{\gamma,r}(n)$ für das Referenzfeld (z. B. einer Cs-137-Quelle) zurückgeführt werden.

$$N_n = k_n \cdot k_{nr} \cdot N_{\gamma,r} \quad (\text{NC.58})$$

Mit den Korrekturfaktoren k_n und k_{nr} ist der auf das Neutronenstrahlungsfeld (N1 bis N4) beim Anwender bzw. auf die Strahlungsenergie bezogene Neutronenkorrekturfaktor $k_{n,E}$:

$$k_n \cdot k_{nr} = \frac{N_n}{N_{\gamma,r}} = k_{n,E} \quad (\text{NC.59})$$

Auch hier wird ein Richtungskorrekturfaktor $k_{n,\Phi}$ eingeführt und zusammen mit den Korrekturfaktoren für die Energie und die Dosimetriesysteme zu einem Faktor vereint:

$$k_{n,E,\Phi} = k_n \cdot k_{nr} \cdot k_{n,\Phi} \quad (\text{NC.60})$$

Es gilt analog zum Korrekturfaktor $k_{\gamma,\text{lin}}$ ein Korrekturfaktor $k_{n,\text{lin}}$ für die Linearität der Dosisanzeige bei kleinen Dosen im Vergleich zur Referenzdosis bei der Kalibrierung. Ferner wird auch hier ein Fadingfaktor berücksichtigt. Der Korrekturfaktor $k_{n,\text{lin}}$ ist im Allgemeinen gleich nach einer Neutronen- oder Photonenbestrahlung. Gleichung (NC.57) erweitert sich damit zu:

$$H_n = k_{n,E,\Phi} \cdot [k_{n,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,6} - M_{0,6}) - k_{\gamma,\text{lin}} \cdot (k_F \cdot M_{m,7} - M_{0,7})] \quad (\text{NC.61})$$

NC.8 Literaturhinweise

- [NC1] Bauer, B. W., Alberts, W. NC., Luszik-Bhadra, M., Siebert, B. R. L.: *Experimental investigation into the influence of neutron energy, angle of incidence, and phantom shape on the response of individual neutron dosemters: detailed analysis of results for the albedo neutron dosemeter in use at the PTB*. Bericht PTB-N-2, PTB, Braunschweig, 1990.
- [NC2] Piesch, E., Burgkhardt, B.: *Environmental monitoring: European Interlaboratory Test Programs for Integrating Dosemeter Systems*. Radiological Protection 29, EUR 8932, CEC (Luxemburg) 1984.

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

Einleitung

Die nach dieser Norm mittels statistischer Tests und vorgegebener Wahrscheinlichkeiten festzulegenden Grenzen gestatten es, Nachweismöglichkeiten für eine Messgröße und den durch diese Messgröße quantifizierten physikalischen Effekt wie folgt zu beurteilen:

- Die „Erkennungsgrenze“ erlaubt eine Entscheidung darüber, ob der durch die Messgröße quantifizierte physikalische Effekt vorliegt oder nicht.
- Die „Nachweisgrenze“ gibt an, welcher kleinste wahre Wert der Messgröße mit einem anzuwendenden Messverfahren noch nachgewiesen werden kann. Sie erlaubt damit eine Entscheidung darüber, ob das Messverfahren gestellten Anforderungen genügt und damit für den vorgesehenen Messzweck geeignet ist oder nicht.
- Die „Vertrauensgrenzen“ schließen im Fall, dass das Vorliegen des physikalischen Effektes erkannt wird, einen Vertrauensbereich ein, der mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit den wahren Wert der Messgröße enthält.

Die genannten Grenzen werden im Folgenden zusammenfassend „charakteristische Grenzen“ genannt.

Weil der Messunsicherheit in dieser Norm eine wichtige Rolle zukommt, werden die Auswertung von Messungen und die Behandlung von Messunsicherheiten nach den allgemeinen Verfahren gemäß ISO/IEC Guide 98-3:2008, *Uncertainty of measurement – Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (ISO/IEC GUIDE 98-3:1995)* (siehe auch Literaturhinweise [1], [2]) durchgeführt. Dies ermöglicht die strikte Trennung der Auswertung der Messungen einerseits (Abschnitt 5) und der Festlegung und Berechnung der charakteristischen Grenzen andererseits (Abschnitt 6). Diese Norm basiert auf der Bayes-Statistik, d. h. entsprechend [6] bis [19] können bei ihrer Anwendung auch solche unsichere Größen und Einflüsse berücksichtigt werden, die sich bei mehrmals wiederholten oder bei zählenden Messungen nicht zufällig verhalten.

Es werden Gleichungen für die Berechnung der charakteristischen Grenzen für eine Kernstrahlungs-Messgröße über die Standardmessunsicherheit der Messgröße (im Folgenden „Standardunsicherheit“ genannt) angegeben. Dabei werden sowohl Standardunsicherheiten der Messung als auch solche der Probenbehandlung, der Kalibrierung der Messeinrichtung und anderer Einflüsse berücksichtigt. Letztere Standardunsicherheiten werden aber als aus Voruntersuchungen bekannt angenommen.

1 Anwendungsbereich

Diese Norm legt im Bereich der Metrologie ionisierender Strahlung „Erkennungsgrenze“, „Nachweisgrenze“ und „Vertrauensgrenzen“ für eine nichtnegative Messgröße der ionisierenden Strahlung fest, wobei sich die Messgröße aus einer Bruttozählrate und einer Nulleffektzählrate sowie weiteren Größen aufgrund eines Modells der Auswertung ergibt. Speziell kann die Messgröße die Nettozählrate als Differenz der Bruttozählrate und der Nulleffektzählrate oder die Nettoaktivität einer Probe sein. Sie kann auch durch Kalibrierung der Messeinrichtung, Probenbehandlung und andere Faktoren beeinflusst sein.

Diese Norm gilt auf gleiche Weise auch bei

- zählenden Messungen an bewegten Objekten (siehe Anhang B, B.2),
- Messungen mit linearen, analog arbeitenden Zählratenmessgeräten (im Folgenden Ratemeter genannt, siehe Anhang B, B.3),
- wiederholten zählenden Messungen mit zufälligen Einflüssen (siehe Anhang B, B.4),
- zählenden Messungen an Filtern während der Anreicherung radioaktiver Stoffe (siehe Anhang B, B.5),

- zählenden spektrometrischen Vielkanal-Messungen, wenn einzelne Linien im Spektrum zu betrachten sind und keine Ausgleichsrechnung, z. B. Entfaltung, durchzuführen ist (siehe Anhang C, C.2 bis C.4),
- zählenden spektrometrischen Vielkanal-Messungen aus der Anwendung von Ausgleichsrechnungen (siehe Anhang C, C.5), insbesondere bei alpha- und gamma-spektrometrischen Messungen (siehe Anhang C; C.5.5 bzw. C.5.6).

Sinngemäß gilt diese Norm auch bei anderen Messungen gleich welcher Art, wenn dasselbe Modell der Auswertung anzuwenden ist. In diesem Sinne ist sie auch anwendbar für Messungen mit Albedodosimetern [18]. Weitere praktische Beispiele können in anderen ISO-Normen gefunden werden, z. B. ISO 18589 [21], ISO 9696 [22], ISO 9697 [23], ISO 9698 [24], ISO 9699 [25], ISO 10703 [26], ISO 7503 [27] und ISO 28218 [28].

2 Normative Verweisungen

Die folgenden zitierten Dokumente sind für die Anwendung dieses Dokuments erforderlich. Bei datierten Verweisungen gilt nur die in Bezug genommene Ausgabe. Bei undatierten Verweisungen gilt die letzte Ausgabe des in Bezug genommenen Dokuments (einschließlich aller Änderungen).

ISO 31-0:1992, *Quantities and units – Part 0: General principles*

ISO 31-9:1992, *Quantities and units – Part 9: Atomic and nuclear physics*

ISO/IEC Guide 98-3:2008, *Uncertainty of measurement – Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (ISO/IEC GUIDE 98-3:1995)*^{N1)}

ISO/IEC Guide 99:2007, *International vocabulary of metrology – Basic and general concepts and associated terms (VIM)*

ISO 3534-1 *Statistics – Vocabulary and symbols – Part 1: General statistical terms and terms used in probability*

3 Begriffe

Für die Anwendung dieses Dokuments gelten die folgenden Begriffe und jene aus ISO 31-0, ISO 31-9, ISO/IEC GUIDE 98-3, ISO/IEC Guide 99 und ISO 3534-1.

3.1

Messverfahren

(en: measurement procedure)

Menge genau beschriebener Prozeduren, die zur Ausführung einer bestimmten Messung gemäß einer gegebenen Methode durchgeführt werden

[ISO/IEC Guide 99:2007, 2.6]

3.2

Messgröße

(en: measurand)

zu messende physikalische Größe

[ISO/IEC Guide 99:2007, 2.3]

ANMERKUNG In dieser Norm ist die Messgröße nichtnegativ und quantifiziert einen Kernstrahlungseffekt. Der Effekt liegt nicht vor, wenn der wahre Wert der Messgröße null ist. Ein Beispiel für eine Messgröße ist die Intensität einer Linie in einem Spektrum über dem Untergrund bei einer spektrometrischen Messung.

^{N1)} Nationale Fußnote: Siehe DIN V ENV 13005:1999-06, *Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen; Deutsche Fassung ENV 13005:1999*.

Für Strahlungsmessungen siehe auch DIN VDE 0493 Bbl 2 (VDE 0493 Bbl 2):2007-06, *Strahlenschutz-Messgeräte – Bestimmung der Unsicherheit beim Messen (IEC/TR 62461:2006)*.

3.3

Messergebnis

(en: result of a measurement)

einer Messgröße zugeordneter Wert, der durch eine Messung gewonnen wird

[ISO/IEC Guide 99:2007, 2.9]

3.4

Messunsicherheit

Unsicherheit

(en: uncertainty of measurement, uncertainty)

nichtnegativer Parameter, der die Streuung der Werte charakterisiert, die vernünftigerweise der Messgröße zugeordnet werden können

[ISO/IEC Guide 99:2007, 2.26]

Siehe auch ISO/IEC Guide 98-3.

ANMERKUNG Die Messunsicherheit nach ISO/IEC GUIDE 98-3 enthält üblicherweise mehrere Komponenten. Einige dieser Komponenten können aus statistischen Verteilungen als Ergebnisse von wiederholten Messungen ermittelt und als experimentelle Standardunsicherheiten charakterisiert werden. Die übrigen Komponenten, die auch als Standardunsicherheiten charakterisiert werden können, werden aus angenommenen oder bekannten Wahrscheinlichkeitsverteilungen gewonnen, die auf Erfahrung und anderen Informationen beruhen.

3.5

Modell der Auswertung

(en: model of evaluation)

Menge mathematischer Relationen zwischen allen gemessenen und anderen Größen, die bei der Auswertung der Messung einbezogen werden

ANMERKUNG Das Modell der Auswertung muss nicht eine explizite Funktion sein. Es kann auch ein Algorithmus sein, der mit einem Computerprogramm abgearbeitet wird.

3.6

Erkennungsgrenze

(en: decision threshold)

Wert einer Messgröße, dessen Überschreiten durch ein ermitteltes Messergebnis für diese Messgröße, die einen physikalischen Effekt quantifiziert, anzeigt, dass der physikalische Effekt vorliegt

ANMERKUNG 1 Für den Fall, dass das Messergebnis y größer ist als die Erkennungsgrenze y^* , ist die Erkennungsgrenze so festgelegt, dass die Wahrscheinlichkeit, dass der wahre Wert der Messgröße Null ist, kleiner oder gleich einem vorgegebenen Wert α ist.

ANMERKUNG 2 Wenn das Messergebnis y kleiner als die Erkennungsgrenze y^* ist, kann das Ergebnis nicht dem physikalischen Effekt zugeordnet werden. Trotzdem kann daraus nicht geschlossen werden, dass der physikalische Effekt nicht vorliegt.

3.7

Nachweisgrenze

(en: detection limit)

kleinster wahrer Wert der Messgröße, der mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit durch das Messverfahren erkannt wird

ANMERKUNG Mit der Erkennungsgrenze nach 3.6 ist die Nachweisgrenze der kleinste wahre Wert der Messgröße, für den die Wahrscheinlichkeit für die falsche Entscheidung, dass der wahre Wert der Messgröße Null ist, gleich einem vorgegebenen Wert β ist, wenn der wahre Wert in Wirklichkeit nicht Null ist.

3.8

Vertrauensgrenzen

(en: limits of the confidence interval)

Werte, die ein Intervall begrenzen, das den wahren Wert der Messgröße mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit enthält

ANMERKUNG Die Vertrauensgrenzen legen ein Glaubwürdigkeits-Intervall fest, das auch Bayes-Intervall genannt wird. In dieser Norm wird es mit der vorgegebenen Wahrscheinlichkeit $(1 - \gamma)$ charakterisiert.

3.9

besten Schätzwert für den wahren Wert der Messgröße

(en: best estimate of the true value of the measurand)

Erwartungswert der Wahrscheinlichkeitsverteilung des wahren Wertes der Messgröße, gegeben durch das experimentelle (primäre) Messergebnis und unter Berücksichtigung aller Informationen, die vor der Durchführung der Messung vorlagen

ANMERKUNG Zum besten Schätzwert unter allen möglichen Schätzwerten der Messgröße bei gegebener Information gehört die kleinste Standardunsicherheit.

3.10

Richtwert

(en: guideline value)

Wert zur Beurteilung, ob ein Messverfahren für die Messgröße aus wissenschaftlichen, gesetzlichen oder anderen Gründen gestellten Anforderungen genügt

ANMERKUNG 1 Ein Richtwert kann z. B. als Aktivität, spezifische Aktivität oder Aktivitätskonzentration, Oberflächenaktivität oder Dosisrate gegeben sein.

ANMERKUNG 2 Der Vergleich der Nachweisgrenze mit dem Richtwert erlaubt eine Entscheidung darüber, ob das für die Messung vorgesehene Messverfahren gestellten Anforderungen genügt und damit für den Messzweck geeignet ist oder nicht. Das Messverfahren genügt den Anforderungen, wenn die Nachweisgrenze kleiner ist als der Richtwert.

3.11

Nulleffekt

(en: background effect)

Messeffekt, der durch andere Strahlungsquellen als die des Messobjektes selbst bewirkt wird

BEISPIEL Natürliche Strahlungsquellen.

3.12

Nettoeffekt

(en: net effect)

Beitrag der möglichen Strahlung eines Messobjektes (z. B. einer Strahlungsquelle oder eines Strahlungsfeldes) zum Messeffekt

3.13

Bruttoeffekt

(en: gross effect)

Messeffekt, der durch den Nulleffekt und den Nettoeffekt bewirkt wird

3.14

Abschirmfaktor

(en: shielding factor)

Faktor, der die Reduzierung der Nulleffektzählrate durch die Abschirmwirkung des Messobjektes beschreibt

3.15

Dämpfungszeitkonstante

(en: relaxation time constant)

Zeitdauer, in der das Ausgangssignal eines linearen Ratemeters auf das $1/e$ -fache des Anfangswertes abklingt, nachdem die Folge der Eingangsimpulse abgebrochen ist

3.16

Untergrund bei spektrometrischen Messungen

(en: background in spectrometric measurements)

Anzahl der nicht interessierenden Ereignisse im Bereich einer betrachteten Linie im Spektrum

ANMERKUNG Die Ereignisse können sowohl vom Nulleffekt durch die Umgebungsstrahlung als auch von der Probe selbst (z. B. von anderen Linien) herrühren.

4 Größen und Formelzeichen

Die Formelzeichen für Hilfsgrößen sowie die nur in den Anhängen benutzten Formelzeichen sind nicht aufgeführt. Physikalische Größen werden mit Großbuchstaben bezeichnet und müssen sorgfältig von ihren Werten unterschieden werden, die mit den entsprechenden Kleinbuchstaben bezeichnet werden. Zusätzlich werden spezielle Größen und Formelzeichen für Entfaltungen bei spektrometrischen Messungen in C.5.1 und für Bayes-Statistik in F.2.1 in dieser Norm benutzt.

m	Anzahl der Eingangsgrößen
X_i	Eingangsgröße ($i = 1, \dots, m$)
x_i	Schätzwert der Eingangsgröße X_i
$u(x_i)$	Standardunsicherheit der Eingangsgröße X_i zum Schätzwert x_i
$h_i(x_i)$	Standardunsicherheit $u(x_i)$ als Funktion des Schätzwertes x_i
Δx_i	Breite des Bereichs der möglichen Werte der Eingangsgröße X_i
$u_{\text{rel}}(w)$	relative Standardunsicherheit einer Größe W zum Schätzwert w
G	Modellfunktion
Y	Zufallsvariable als Schätzer für die Messgröße; auch als Formelzeichen für die nichtnegative Messgröße selbst verwendet, die den betrachteten physikalischen Effekt quantifiziert
$\tilde{y}$	wahrer Wert der Messgröße. Liegt der betrachtete physikalische Effekt nicht vor, so ist $\tilde{y} = 0$, andernfalls ist $\tilde{y} > 0$.
y	ermittelter Wert des Schätzers Y ; primäres Messergebnis für die Messgröße
y_j	Werte y aus unterschiedlichen Messungen ($j = 0, 1, 2, \dots$)
$u(y)$	Standardunsicherheit der Messgröße zum primären Messergebnis y
$\tilde{u}(\tilde{y})$	Standardunsicherheit des Schätzers Y als Funktion des wahren Wertes $\tilde{y}$ der Messgröße
$\hat{y}$	besten Schätzwert der Messgröße
$u(\hat{y})$	Standardunsicherheit der Messgröße zum besten Schätzwert $\hat{y}$
y^*	Erkennungsgrenze für die Messgröße
$y^\#$	Nachweisgrenze für die Messgröße
$\tilde{y}_i$	Näherungen der Nachweisgrenze $y^\#$
y_r	Richtwert für die Messgröße
$y^\triangleleft, y^\triangleright$	untere bzw. obere Vertrauensgrenze für die Messgröße
ρ_i	Zählrate als Eingangsgröße X_i
ρ_n	Zählrate des Nettoeffektes (Nettozählrate)
ρ_g	Zählrate des Bruttoeffektes (Bruttozählrate)
ρ_0	Zählrate des Nulleffektes (Nulleffektzählrate)
n_i	Anzahl der gezählten Impulse bei der Messung der Zählrate ρ_i
n_g, n_0	Anzahl der gezählten Impulse des Bruttoeffektes bzw. Nulleffektes
t_i	Messdauer der Zählrate ρ_i
t_g, t_0	Messdauer des Bruttoeffektes bzw. Nulleffektes
r_i	Schätzwert der Zählrate ρ_i
r_g, r_0	Schätzwert der Zählrate des Bruttoeffektes bzw. Nulleffektes
τ_g, τ_0	Dämpfungszeitkonstante eines Ratemeters bei der Messung des Bruttoeffektes bzw. Nulleffektes
α, β	Wahrscheinlichkeit des Fehlers erster bzw. zweiter Art
$1-\gamma$	Wahrscheinlichkeit zum Vertrauensbereich für die Messgröße
k_p, k_q	Quantile der standardisierten Normalverteilung zur Wahrscheinlichkeit p bzw. q (z. B. $p = 1 - \alpha$, $1 - \beta$ oder $1 - \gamma/2$)
$\Phi(t)$	Verteilungsfunktion der standardisierten Normalverteilung. Es gilt $\Phi(k_p) = p$.

5 Grundlagen

5.1 Allgemeines zur Messgröße

Dem zu untersuchenden physikalischen Effekt einer gestellten Messaufgabe ist eine nichtnegative Messgröße zuzuweisen, die den Effekt quantifiziert und den wahren Wert $\bar{y} = 0$ annimmt, wenn der Effekt in einem aktuellen Fall nicht vorliegt.

Der Messgröße ist dann eine Zufallsvariable Y , ein Schätzer, zuzuordnen. Das Formelzeichen Y wird im Folgenden auch für die Messgröße selbst verwendet. Ein aus Messungen ermittelter Wert y des Schätzers Y ist ein Schätzwert der Messgröße. Er ist als primäres Messergebnis zusammen mit der ihm zugehörenden primären Standardunsicherheit $u(y)$ der Messgröße als primäres vollständiges Messergebnis für die Messgröße nach ISO/IEC GUIDE 98-3 (siehe auch Literaturhinweise [1], [2]) zu berechnen und zwar durch Auswertung von Messdaten und anderer Information mittels eines Modells (der Auswertung) (siehe 5.2), das alle beteiligten Größen mathematisch miteinander verknüpft. Im Allgemeinen wird bei dieser Auswertung nicht explizit berücksichtigt, dass die Messgröße nichtnegativ ist. Deshalb darf y negativ sein, zumal wenn die Messgröße nahezu den wahren Wert $\bar{y} = 0$ hat. Das primäre Messergebnis y unterscheidet sich von dem in 6.5 berechneten besten Schätzwert $\hat{y}$ der Messgröße. Bei diesem ist die Kenntnis berücksichtigt, dass die Messgröße nichtnegativ ist. Die zu $\hat{y}$ gehörende Standardunsicherheit $u(\hat{y})$ ist kleiner als $u(y)$.

5.2 Modell

5.2.1 Allgemeines Modell

In vielen Fällen ist die Messgröße Y eine Funktion mehrerer Eingangsgrößen X_i in Form von Gleichung (1):

$$Y = G(X_1, \dots, X_m) \quad (1)$$

Gleichung (1) ist das Modell der Auswertung. Durch Einsetzen gegebener Schätzwerte x_i der Eingangsgrößen X_i in die Modellfunktion G nach Gleichung (1) ergibt sich das primäre Messergebnis y der Messgröße:

$$y = G(x_1, \dots, x_m) \quad (2)$$

Die Standardunsicherheit $u(y)$ der Messgröße zum primären Messergebnis y folgt bei unabhängig gemessenen Eingangsgrößen X_i und gegebenen Standardunsicherheiten $u(x_i)$ zu den Schätzwerten x_i aus der Beziehung in Gleichung (3):

$$u^2(y) = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial G}{\partial X_i} \right)^2 u^2(x_i) \quad (3)$$

In die partiellen Ableitungen von G in Gleichung (3) sind anstelle der Eingangsgrößen X_i deren Schätzwerte x_i einzusetzen. Zur Ermittlung der Schätzwerte x_i und der zugehörigen Standardunsicherheiten $u(x_i)$ sowie zur numerischen oder experimentellen Ermittlung der partiellen Ableitungen siehe ISO/IEC GUIDE 98-3 (siehe auch Literaturhinweise [1], [2]). Für eine Zählrate $X_i = \rho_i$ sind bei vorliegendem Zählergebnis n_i während der Messdauer t_i anzusetzen: $x_i = r_i = n_i/t_i$ und $u^2(x_i) = n_i/t_i^2 = r_i/t_i$ (siehe auch F.1). Wenn die Eingangsgrößen nicht unabhängig voneinander gemessen werden und für kompliziertere Auswertungen, z. B. Entfaltungen, siehe C.5.2.

In 5.2.2 wird die Eingangsgröße X_1 als diejenige Größe aufgefasst, deren Wert x_1 bei Vorgabe eines wahren Wertes $\bar{y}$ der Messgröße Y im Rahmen der Berechnung der Erkennungsgrenze und Nachweisgrenze nicht vorliegt, z. B. als Zählrate des Bruttoeffektes. Entsprechend wird die Eingangsgröße X_2 dem Nulleffekt auf geeignete Weise zugeordnet. Die Daten zu den übrigen Eingangsgrößen seien aus unabhängigen Voruntersuchungen gegeben.

5.2.2 Modell bei Kernstrahlungsmessungen

In dieser Norm bezieht sich die Messgröße Y mit dem wahren Wert $\bar{y}$ auf eine Probe radioaktiven Materials und ist aus Zählungen des Bruttoeffektes und des Nulleffektes bei Zeit- oder Impulsvorwahl zu ermitteln. Y kann speziell die Nettozählrate ρ_n oder die Nettoaktivität A der Probe sein. Die Formelzeichen zu den Zählungen des Bruttoeffektes und des Nulleffektes werden im Folgenden durch den Index g bzw. 0 gekennzeichnet.

In dieser Norm wird das Modell wie folgt angesetzt:

$$Y = G(X_1, \dots, X_m) = (X_1 - X_2 X_3 - X_4) \cdot \frac{X_6 X_8 \dots}{X_5 X_7 \dots} = (X_1 - X_2 X_3 - X_4) \cdot W \quad (4)$$

mit

$$W = \frac{X_6 X_8 \dots}{X_5 X_7 \dots} \quad (5)$$

Hierbei sind $X_1 = \rho_g$ die Zählrate des Bruttoeffektes und $X_2 = \rho_0$ die Zählrate des Nulleffektes. Die übrigen Eingangsgrößen X_i sind Kalibrier-, Korrekptions- oder Einflussgrößen oder Umrechnungsfaktoren, z. B. die Emissions- oder Ansprechwahrscheinlichkeit, speziell X_3 z. B. ein Abschirmfaktor und X_4 ein zusätzlicher Untergrundkorrekturfaktor. Falls einige dieser Eingangsgrößen nicht vorkommen, sind für diese $x_i = 1$ ($i = 3; i > 4$), $x_4 = 0$ und $u(x_i) = 0$ zu setzen. Für die Zählraten sind $x_1 = r_g = n_g/t_g$ und $u^2(x_1) = n_g/t_g^2 = r_g/t_g$ sowie $x_2 = r_0 = n_0/t_0$ und $u^2(x_2) = n_0/t_0^2 = r_0/t_0$.

Aus Gleichung (4) ergibt sich durch Einsetzen der Schätzwerte x_i der primäre Schätzwert y der Messgröße Y :

$$y = G(x_1, \dots, x_m) = (x_1 - x_2 x_3 - x_4) \cdot w = \left(\frac{n_g}{t_g} - \frac{n_0}{t_0} x_3 - x_4 \right) \cdot w \quad (6)$$

mit

$$w = \frac{x_6 x_8 \dots}{x_5 x_7 \dots} \quad (7)$$

Mit den partiellen Ableitungen

$$\frac{\partial G}{\partial X_1} = W; \quad \frac{\partial G}{\partial X_2} = -X_3 W; \quad \frac{\partial G}{\partial X_3} = -X_2 W; \quad \frac{\partial G}{\partial X_4} = -W; \quad \frac{\partial G}{\partial X_i} = \pm \frac{Y}{X_i} \quad (i \geq 5) \quad (8)$$

entsteht aus Gleichung (3) durch Einsetzen der Schätzwerte x_i , w und y die zu y gehörende Standardunsicherheit $u(y)$ der Messgröße:

$$u(y) = \sqrt{w^2 \cdot [u^2(x_1) + x_3^2 u^2(x_2) + x_2^2 u^2(x_3) + u^2(x_4)] + y^2 u_{\text{rel}}^2(w)} \quad (9)$$

$$= \sqrt{w^2 \cdot \left[r_g/t_g + x_3^2 r_0/t_0 + r_0^2 u^2(x_3) + u^2(x_4) \right] + y^2 u_{\text{rel}}^2(w)}$$

Dabei ist

$$u_{\text{rel}}^2(w) = \sum_{i=5}^m \frac{u^2(x_i)}{x_i^2} \quad (10)$$

die Summe der quadrierten relativen Standardunsicherheiten der Größen X_5 bis X_m . Für $m < 5$ sind $w = 1$ und $u_{\text{rel}}^2(w) = 0$.

Schätzwert x_i und Standardunsicherheit $u(x_i)$ von X_i ($i = 3, \dots, m$) werden in Vorversuchen experimentell ermittelt oder nach anderen Informationen als Erfahrungswerte übernommen. Bei Vorversuchen können x_i als Mittelwert und $u^2(x_i)$ als empirische Varianz ermittelt werden (siehe B.4.1). $u^2(x_i)$ kann erforderlichen-

falls auch als Varianz einer Rechteckverteilung über den Bereich der möglichen Werte von X_i mit der Breite Δx_i zu $u^2(x_i) = (\Delta x_i)^2 / 12$ berechnet werden.

Zur Anwendung des Verfahrens bei speziellen, auch spektrometrischen Messungen siehe Anhänge B und C.

5.3 Berechnung der Standardunsicherheit als Funktion der Messgröße

5.3.1 Allgemeines

Für die Festlegung und numerische Berechnung der Erkennungsgrenze in 6.2 und der Nachweisgrenze in 6.3 wird die Standardunsicherheit der Messgröße als Funktion $\tilde{u}(\tilde{y})$ des wahren Wertes $\tilde{y} \geq 0$ der Messgröße benötigt. Diese Funktion ist im Rahmen der Auswertung der Messungen auf ähnliche Weise wie $u(y)$ unter Anwendung von ISO/IEC GUIDE 98-3 (siehe auch Literaturhinweise [1], [2]) zu ermitteln. Meist ist $\tilde{u}(\tilde{y})$ als positive Quadratwurzel aus einer vorher zu berechnenden Varianz $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ zu bilden. Diese Funktion muss für alle $\tilde{y} \geq 0$ erklärt, eindeutig und stetig sein und darf keine negativen Werte annehmen.

In manchen Fällen kann $\tilde{u}(\tilde{y})$ explizit angegeben werden. Voraussetzung dafür ist, dass $u(x_1)$ als Funktion $h_1(x_1)$ von x_1 vorliegt. Dann ist y durch $\tilde{y}$ zu ersetzen, und Gleichung (2) ist nach x_1 aufzulösen. Bei Vorgabe von $\tilde{y}$ kann x_1 auch numerisch, z. B. mittels eines Iterationsverfahrens, aus Gleichung (2) berechnet werden. Das ergibt x_1 als Funktion von $\tilde{y}$ und $x_2, \dots, x_m$. Damit ist x_1 in Gleichung (3) und in $u(x_1) = h_1(x_1)$ zu ersetzen, was schließlich $\tilde{u}(\tilde{y})$ statt $u(y)$ erbringt. Auf diese Weise ist im Fall des Modells nach Gleichung (6) nach 5.3.2 vorzugehen. Anderenfalls ist 5.3.3 anzuwenden, wobei $\tilde{u}(\tilde{y})$ als Näherung durch Interpolation aus den Daten y_j und $u(y_j)$ mehrerer Messungen folgt.

5.3.2 Explizite Berechnung

Ist im Fall des Modells nach Gleichung (6) die Standardunsicherheit $u(x_1)$ der Zählrate $X_1 = \rho_g$ des Bruttoeffektes als Funktion $h_1(x_1)$ des Schätzwertes $x_1 = t_g$ gegeben, gelten $h_1(x_1) = \sqrt{x_1/t_g}$ bei Vorwahl der Messdauer t_g (Zeitvorwahl) und $h_1(x_1) = x_1/\sqrt{n_g}$ bei Vorwahl der Impulsanzahl n_g (Impulsvorwahl).

Es wird y formal durch $\tilde{y}$ ersetzt. Dadurch können x_1 im allgemeinen Fall und speziell n_g bei Zeitvorwahl und t_g bei Impulsvorwahl in Gleichungen (9) mittels Gleichung (6) eliminiert werden. Diese Werte liegen bei Vorgabe von $\tilde{y}$ nicht vor. Das ergibt allgemein nach Gleichung (6)

$$x_1 = \tilde{y}/w + x_2x_3 + x_4 \quad (11)$$

Durch Einsetzen von x_1 nach Gleichung (11) in die gegebene Funktion $h_1(x_1)$, d. h. mit $u^2(x_1) = h_1^2(\tilde{y}/w + x_2x_3 + x_4)$, folgt dann aus Gleichung (9):

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = w^2 \left[h_1^2(\tilde{y}/w + x_2x_3 + x_4) + x_3^2 u^2(x_2) + x_2^2 u^2(x_3) + u^2(x_4) \right] + \tilde{y}^2 u_{\text{rel}}^2(w) \quad (12)$$

Bei Zeitvorwahl ergibt sich aus Gleichung (11) wegen $x_1 = n_g/t_g$ und $x_2 = r_0$:

$$n_g = t_g \cdot (\tilde{y}/w + r_0x_3 + x_4) \quad (13)$$

Aus Gleichung (12) folgt dann mit $h_1^2(x_1) = x_1/t_g = n_g/t_g^2$ und durch Einsetzen von n_g nach Gleichung (13) sowie mit $u^2(x_2) = r_0^2/t_0$

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = \sqrt{w^2 \cdot \left[(\tilde{y}/w + r_0x_3 + x_4)/t_g + x_3^2 r_0^2/t_0 + r_0^2 u^2(x_3) + u^2(x_4) \right] + \tilde{y}^2 u_{\text{rel}}^2(w)} \quad (14)$$

Bei Impulsvorwahl ist entsprechend

$$t_g = \frac{n_g}{\tilde{y}/w + r_0x_3 + x_4} \quad (15)$$

Aus Gleichung (12) folgt dann mit $h_1^2(x_1) = x_1/t_g = n_g/t_g^2$ durch Einsetzen von t_g nach Gleichung (15) und mit $u^2(x_2) = r_0^2/n_0$:

$$\tilde{u}(\tilde{y}) = \sqrt{w^2 \cdot \left[(\tilde{y}/w + r_0 x_3 + x_4)^2 / n_g + x_3^2 r_0^2 / n_0 + r_0^2 u^2(x_3) + u^2(x_4) \right] + \tilde{y}^2 u_{\text{rel}}^2(w)} \quad (16)$$

Für die Nachweisgrenze $y^\#$ hat Gleichung (22) eine Lösung, wenn bei Zeitvorwahl die Bedingung

$$k_{1-\beta} u_{\text{rel}}(w) < 1 \quad (17)$$

und bei Impulsvorwahl die Bedingung

$$k_{1-\beta} \cdot \sqrt{\frac{1}{n_g} + u_{\text{rel}}^2(w)} < 1 \quad (18)$$

erfüllt ist. Anderenfalls kann es vorkommen, dass aufgrund zu großer Unsicherheit der Größen X_5 bis X_m , die summarisch durch $u_{\text{rel}}(w)$ ausgedrückt wird, eine Nachweisgrenze nicht existiert. Die Bedingung nach Gleichung (17) gilt auch für den Fall von Gleichung (12), wenn $h_1(x_1)$ für große x_1 schwächer ansteigt als x_1 , d. h., wenn $h_1(x_1)/x_1 \rightarrow 0$ für $x_1 \rightarrow \infty$.

5.3.3 Näherungen

Häufig genügen die folgenden Näherungen für die Funktion $\tilde{u}(\tilde{y})$, insbesondere, wenn die Standardunsicherheit $u(x_1)$ nicht als Funktion $h_1(x_1)$ bekannt ist. Voraussetzung dafür ist, dass nach 5.1 und 5.2 berechnete Messergebnisse y_j und zugehörige Standardunsicherheiten $u(y_j)$ von einigen vorausgegangenen gleichartigen Messungen bereits vorliegen ($j = 0, 1, 2, \dots$). Die Messungen müssen an verschiedenen Proben mit unterschiedlichen Aktivitäten, aber sonst unter möglichst ähnlichen Bedingungen ausgeführt worden sein. Eine der Messungen kann eine Nulleffekt- oder Blindprobenmessung mit $\tilde{y} = 0$ und z. B. $j = 0$ sein. Dann ist $y_0 = 0$ zu setzen, und es ist $\tilde{u}(0) = u(y_0)$. Die aktuell erfolgte Messung kann als weitere Messung mit $j = 1$ herangezogen werden.

Die Funktion $\tilde{u}(\tilde{y})$ erweist sich oft als nur langsam steigend. Deshalb genügt in manchen solcher Fälle die Näherung $\tilde{u}(\tilde{y}) = u(y_1)$, vor allem, wenn das primäre Messergebnis y_1 für die Messgröße nicht wesentlich größer als die zugehörige Standardunsicherheit $u(y_1)$ ist.

Sind lediglich $\tilde{u}(0) = u(y_0)$ und $y_1 > 0$ mit $u(y_1)$ bekannt, so reicht oft die folgende lineare Interpolation aus:

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = \tilde{u}^2(0)(1 - \tilde{y}/y_1) + u^2(y_1)\tilde{y}/y_1 \quad (19)$$

Liegen die Ergebnisse y_0 , y_1 und y_2 sowie die zugehörigen Standardunsicherheiten $u(y_0)$, $u(y_1)$ und $u(y_2)$ aus drei Messungen vor, so kann die folgende quadratische Interpolation verwendet werden:

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = u^2(y_0) \cdot \frac{(\tilde{y} - y_1)(\tilde{y} - y_2)}{(y_0 - y_1)(y_0 - y_2)} + u^2(y_1) \cdot \frac{(\tilde{y} - y_0)(\tilde{y} - y_2)}{(y_1 - y_0)(y_1 - y_2)} + u^2(y_2) \cdot \frac{(\tilde{y} - y_0)(\tilde{y} - y_1)}{(y_2 - y_0)(y_2 - y_1)} \quad (20)$$

Sind Ergebnisse aus vielen ähnlichen Messungen gegeben, kann der parabelförmige Verlauf der Funktion $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ auch durch eine Ausgleichsrechnung ermittelt werden.

6 Festlegung der charakteristischen Grenzen und Beurteilungen

6.1 Vorgaben

Die Wahrscheinlichkeit α des Fehlers erster Art, die Wahrscheinlichkeit β des Fehlers zweiter Art und die Wahrscheinlichkeit $1-\gamma$ zum Vertrauensbereich müssen vorgegeben werden. Die Wahl der geeigneten Werte hängt von der jeweiligen Anwendung ab. Häufig werden $\alpha = \beta$ und der Wert 0,05 für α und β gesetzt. Dann gilt $k_{1-\alpha} = k_{1-\beta} = 1,65$. Wenn für γ der Wert 0,05 gewählt wird, dann gilt $k_{\gamma/2} = 1,96$ (siehe Anhang E).

Wenn beurteilt werden soll, ob ein Messverfahren für die Messgröße aus wissenschaftlichen, gesetzlichen oder anderen Gründen gestellten Anforderungen genügt (siehe 6.6), muss auch ein Richtwert y_r als Wert der Messgröße, z. B. als Aktivität, vorgegeben werden.

6.2 Festlegung der Erkennungsgrenze

Die Erkennungsgrenze y^* für die nichtnegative Messgröße nach 5.1, die einen betrachteten physikalischen Effekt quantifiziert, ist derjenige Wert des Schätzers Y , bei dessen Überschreitung durch einen ermittelten Wert von Y , das primäre Messergebnis y , gefolgert wird, dass der physikalische Effekt vorliegt. Anderenfalls wird angenommen, dass dieser Effekt nicht vorliegt. Liegt der physikalische Effekt in Wirklichkeit nicht vor, führt diese Entscheidungsregel höchstens mit der vorzugebenden Wahrscheinlichkeit α zu der dann falschen Entscheidung, der Effekt liege vor.

Ein ermitteltes primäres Messergebnis y für die nichtnegative Messgröße weist nur dann signifikant darauf hin, dass der wahre Wert der Messgröße von null verschieden ist ($\tilde{y} > 0$), wenn es unter der Annahme $\tilde{y} = 0$ genügend unwahrscheinlich ist. Das primäre Messergebnis y muss dazu größer sein als die Erkennungsgrenze

$$y^* = k_{1-\alpha} u(0) \quad (21)$$

6.3 Festlegung der Nachweisgrenze

Die Nachweisgrenze $y^\#$ ist der kleinste wahre Wert der Messgröße, für den bei Anwendung der Entscheidungsregel nach 6.2 die Wahrscheinlichkeit dafür, fälschlich anzunehmen, dass der physikalische Effekt nicht vorliegt (Fehler zweiter Art), höchstens gleich der vorzugebenden Wahrscheinlichkeit β ist (siehe 6.1).

Zur Prüfung, ob ein Messverfahren für den Messzweck geeignet ist, wird die Nachweisgrenze $y^\#$ mit dem vorzugebenden Richtwert y_r für die Messgröße verglichen (siehe 6.1 und 6.6). Die Nachweisgrenze $y^\#$ ist der kleinste wahre Wert der Messgröße, der mit dem anzuwendenden Messverfahren noch nachgewiesen werden kann. Sie liegt so hoch über der Erkennungsgrenze y^* , dass die Wahrscheinlichkeit des Fehlers zweiter Art höchstens gleich β ist. Die Nachweisgrenze $y^\#$ wird als die kleinste Lösung der Gleichung

$$y^\# = y^* + k_{1-\beta} \tilde{u}(y^\#) \quad (22)$$

festgelegt. Es gilt immer $y^\# \geq y^*$.

Gleichung (22) ist eine implizite Gleichung, ihre rechte Seite hängt selbst von $y^\#$ ab. Die Nachweisgrenze lässt sich durch Auflösen von Gleichung (22) nach $y^\#$ berechnen, einfacher jedoch durch Iteration, wobei durch wiederholtes Einsetzen einer Näherung $\tilde{y}_i$ für $y^\#$ in die rechte Seite von Gleichung (22) eine verbesserte Näherung $\tilde{y}_{i+1}$ erzeugt wird (siehe Bild 1):

$$\tilde{y}_{i+1} = y^* + k_{1-\beta} \tilde{u}(\tilde{y}_i) \quad (23)$$

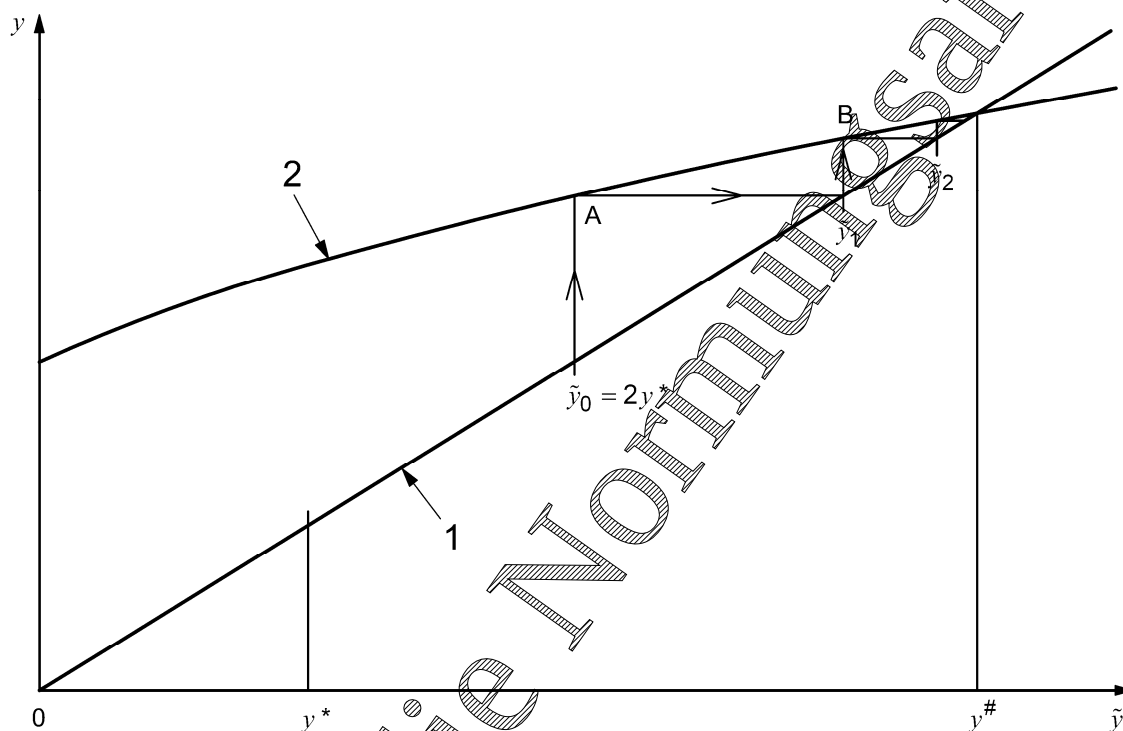
Als Anfangsnäherung kann z. B. $\tilde{y}_0 = 2y^*$ gewählt werden. Die Iteration konvergiert meistens, nicht aber, wenn Gleichung (22) keine Lösung $y^\#$ besitzt. Im letzteren Fall oder wenn sich $y^\# < y^*$ ergibt existiert die

Nachweisgrenze nicht (siehe 5.3.2 und 6.6). In dieser Situation kann ein vergrößerter Wert für β eine Lösung von Gleichung (22) ermöglichen.

Nach Berechnung von $\tilde{y}_1$ oder mit einer geeigneten Wahl von z. B. $\tilde{y}_1 = 3y^*$ lässt sich für $i \geq 1$ vorteilhafter die im Allgemeinen rascher konvergierende *regula falsi* anwenden. Dafür ist Gleichung (23) zu ersetzen durch

$$\tilde{y}_{i+1} = \frac{y^* + k_{1-\beta} \cdot [\tilde{y}_i \tilde{u}(\tilde{y}_j) - \tilde{y}_j \tilde{u}(\tilde{y}_i)] / (\tilde{y}_i - \tilde{y}_j)}{1 - k_{1-\beta} \cdot [\tilde{u}(\tilde{y}_i) - \tilde{u}(\tilde{y}_j)] / (\tilde{y}_i - \tilde{y}_j)} \quad (24)$$

mit $j < i$. Es sollte $j = 0$ gesetzt oder j nach einigen Iterationsschritten festgelegt werden (siehe Bild 1).



Legende

- 1 Gerade $y = \tilde{y}$
- 2 Kurve $y = y^* + k_{1-\beta} \tilde{u}(\tilde{y})$
- $\tilde{y}$ wahrer Wert der Messgröße
- y ermittelter Wert der Messgröße

Weitere Formelzeichen siehe Text.

Bild 1 – Iterative Berechnung der Nachweisgrenze

Beginnend mit einer Anfangsnäherung $\tilde{y}_0$, z. B. $\tilde{y}_0 = 2y^*$ wie in Bild 1 dargestellt, konvergieren bei der Iteration nach Gleichung (23) oder Gleichung (24) die Folgen der verbesserten Näherungen $\tilde{y}_i$ ($j = 1, 2, \dots$) gegen die Nachweisgrenze y^* als Abszisse des Schnittpunktes der Geraden (Punkt 1 der Legende zu Bild 1) mit der Kurve (Punkt 2 der Legende zu Bild 1). y^* ist die Erkennungsgrenze. Bei alternativer Anwendung der *regula falsi* nach Gleichung (24) wird die Folge $\tilde{y}_i$ mittels Sekanten von Kurve 2, z. B. durch die Punkte A und B, erzeugt. Der dargestellte hyperbolische Verlauf von Kurve 2 ist typisch für viele Anwendungen, z. B. solchen mit Gleichung (14) oder Gleichung (16). Die Nachweisgrenze existiert nicht, wenn die Kurve (Punkt 2 der Legende zu Bild 1) die Gerade (Punkt 1 der Legende zu Bild 1) an keiner Stelle $\tilde{y} \geq y^*$ schneidet.

Jede Iteration ist abzubrechen, wenn eine vorzugebende Genauigkeit von ν Stellen erreicht ist, also in der Folge der Näherungen die ν ersten Stellen sich nicht mehr ändern. Wird aber zu hohe Genauigkeit verlangt, so fluktuiert auch bei einer im Prinzip konvergierenden Iteration die Folge der Näherungen in der Regel ständig dicht um die exakte Lösung herum, ohne diese je zu erreichen. Dann ist ν zu verkleinern.

Mit der Näherung $\tilde{u}(\tilde{y}) = u(y)$ (siehe 5.3.3) gilt $y^\# = (k_{1-\alpha} + k_{1-\beta}) u(y)$.

Mit der linearen Interpolation nach Gleichung (19) ergibt sich die Näherung

$$y^\# = a + \sqrt{a^2 + (k_{1-\beta}^2 - k_{1-\alpha}^2) \tilde{u}^2(0)} \quad (25)$$

mit

$$a = k_{1-\alpha} \tilde{u}(0) + \frac{1}{2} (k_{1-\beta}^2 / y_1) [u^2(y_1) - \tilde{u}^2(0)] \quad (26)$$

Wenn $\alpha = \beta$, folgt $y^\# = 2a$.

Wenn $\alpha = \beta$ gewählt wird und $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ wie in den Gleichungen (14), (16) und (20) mit einem Polynom zweiten Grades $\tilde{u}^2(\tilde{y}) = c_0 + c_1 \tilde{y} + c_2 \tilde{y}^2$ erhalten oder angenähert wird, dann gilt mit $k = k_{1-\alpha} = k_{1-\beta}$:

$$y^* = k \sqrt{c_0} \quad (27)$$

und

$$y^\# = \frac{2y^* + k^2 c_1}{1 + k^2 c_2} \quad (28)$$

6.4 Festlegung der Vertrauensgrenzen

Die Vertrauensgrenzen als Grenzen eines Vertrauensbereichs sind zu einem nach 6.2 erkannten physikalischen Effekt so angegeben, dass der Vertrauensbereich den wahren Wert der Messgröße mit der vorzugebenden Wahrscheinlichkeit $1-\gamma$ enthält (siehe 6.1). Die Vertrauensgrenzen berücksichtigen, dass die Messgröße nichtnegativ ist.

Bei vorliegendem primärem Messergebnis y und der zu y gehörenden Standardunsicherheit $u(y)$ der Messgröße (siehe 5.2) sind die untere Vertrauensgrenze $y^\triangleleft$ und die obere Vertrauensgrenze $y^\triangleright$ festgelegt durch

$$y^\triangleleft = y - k_p u(y) \quad \text{mit} \quad p = \omega \cdot (1 - \gamma/2) \quad (29)$$

$$y^\triangleright = y + k_q u(y) \quad \text{mit} \quad q = 1 - \omega \gamma/2 \quad (30)$$

Dabei ist

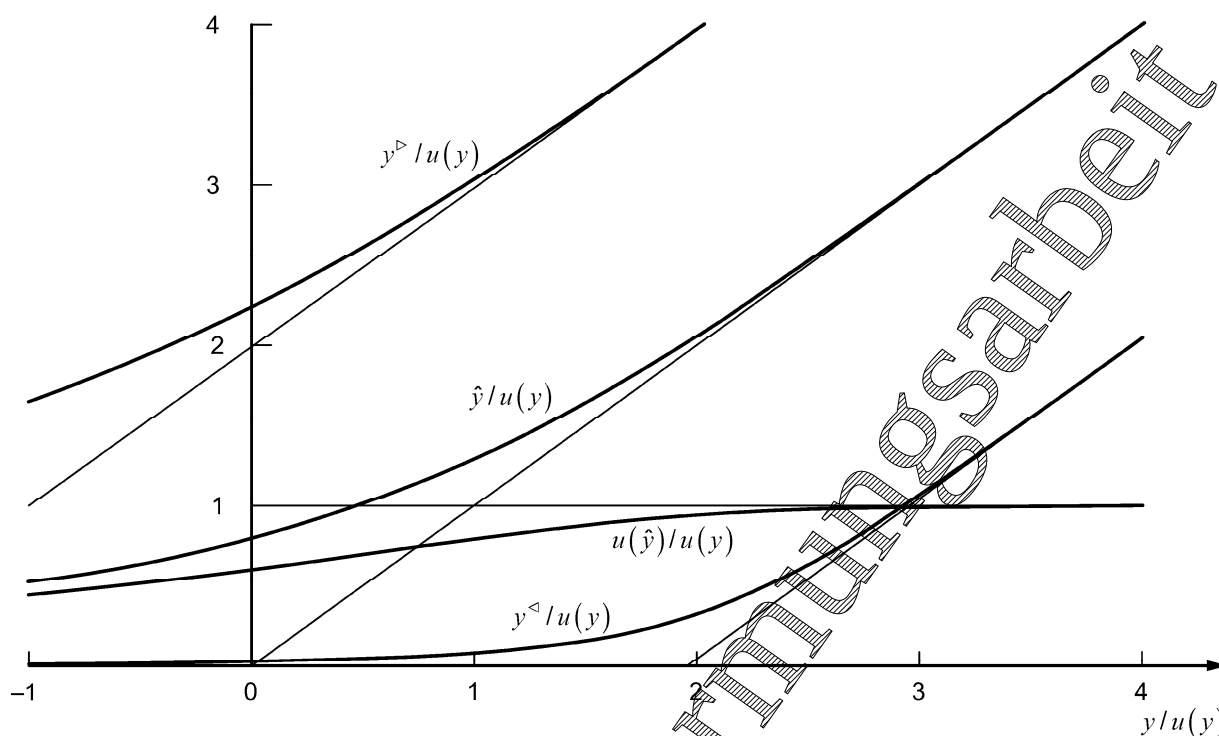
$$\omega = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{y/u(y)} \exp\left(-\frac{v^2}{2}\right) dv = \Phi[y/u(y)] \quad (31)$$

Zur Verteilungsfunktion $\Phi(t)$ der standardisierten Normalverteilung und zu ihrer Umkehrung $k_p = t$ für $\Phi(t) = p$ siehe Tabelle E.1 und Methoden zu ihrer Berechnung in Anhang E sowie z. B. [29].

Die Vertrauensgrenzen liegen in der Regel weder symmetrisch zu y noch zum besten Schätzwert $\hat{y}$ (siehe 6.5 und Bild 2), jedoch sind die Wahrscheinlichkeiten, dass die Messgröße kleiner $y^\triangleleft$ oder größer $y^\triangleright$ ist, beide gleich $\gamma/2$. Es gelten die Beziehungen $0 < y^\triangleleft < y^\triangleright$.

Es darf $\omega = 1$ gesetzt werden, wenn $y \geq 4u(y)$. In diesem Fall gelten die zu y symmetrischen Näherungen

$$y^{\triangleleft} = y - k_{1-\gamma/2} u(y) \quad \text{und} \quad y^{\triangleright} = y + k_{1-\gamma/2} u(y) \quad (32)$$



Legende

$y/u(y)$ Quotient aus dem primären Messergebnis der Messgröße und der zugehörigen Standardunsicherheit in Verbindung mit dem besten Schätzwert

Erläuterungen der Kurven siehe Text^{N2)}.

Bild 2 – Bester Schätzwert und Vertrauensgrenzen

Bester Schätzwert $\hat{y}$ der Messgröße, zugehörige Standardunsicherheit $u(\hat{y})$, untere Vertrauensgrenze $y^{\triangleleft}$ und obere Vertrauensgrenze $y^{\triangleright}$ sind in Bild 2 dargestellt als Funktionen des primären Messergebnisses y . Alle diese Werte sind mit der Standardunsicherheit $u(y)$ skaliert, und es ist $\gamma = 0,05$ gesetzt. Die ansteigenden Geraden sowie die Horizontale mit der Ordinate 1 sind Asymptoten.

6.5 Beurteilung eines Messergebnisses

Das ermittelte primäre Messergebnis y für die Messgröße ist mit der Erkennungsgrenze y^* zu vergleichen. Ist $y > y^*$, so gilt der durch die Messgröße quantifizierte physikalische Effekt als vorliegend erkannt. Andernfalls wird entschieden, dass der Effekt nicht vorliegt.

Ist $y \geq y^*$, ergibt sich mit ω nach Gleichung (31) als bester Schätzwert $\hat{y}$ der Messgröße (siehe 5.1 Anmerkung sowie Bild 2):

$$\hat{y} = y + \frac{u(y) \exp\left\{-y^2 / [2u^2(y)]\right\}}{\omega \sqrt{2\pi}} \quad (33)$$

^{N2)} Nationale Fußnote: Die Bezeichnung der unteren Kurve wurde gegenüber dem ISO-Original korrigiert. Dort war sie fälschlicherweise so bezeichnet wie die obere Kurve.

Die zu $\hat{y}$ gehörende Standardunsicherheit lautet

$$u(\hat{y}) = \sqrt{u^2(y) - (\hat{y} - y)\hat{y}} \quad (34)$$

ANMERKUNG 1 Wenn der beste Schätzwert $\hat{y}$ und seine Standardunsicherheit $u(\hat{y})$ berechnet werden, kann auf die Angabe des primären Messergebnisses y und seiner Standardunsicherheit $u(y)$ verzichtet werden.

ANMERKUNG 2 Auch wenn die Entscheidungsregel für die Erkennungsgrenze nicht benutzt wird, und wenn $y < y^*$, können der beste Schätzwert $\hat{y}$ und seine Standardunsicherheit $u(\hat{y})$ berechnet werden.

Es gelten die Beziehungen $y < \hat{y}$, $0 < \hat{y}$ und $y^{\triangleleft} < \hat{y} < y^{\triangleright}$ sowie $u(\hat{y}) < u(y)$ und $u(\hat{y}) < \hat{y}$. Überdies gelten für $y \geq 4u(y)$ die Näherungen

$$\hat{y} = y; \quad u(\hat{y}) = u(y) \quad (35)$$

6.6 Beurteilung eines Messverfahrens

Die Entscheidung, ob ein anzuwendendes Messverfahren gestellten Anforderungen bezüglich des Nachweises des durch die Messgröße quantifizierten physikalischen Effektes genügt, wird durch Vergleich der Nachweisgrenze $y^{\#}$ mit dem vorgegebenen Richtwert y_r getroffen. Ist $y^{\#} > y_r$ oder besitzt Gleichung (22) keine Lösung $y^{\#}$, so ist das Messverfahren für den vorgesehenen Messzweck hinsichtlich der Anforderungen nicht geeignet.

Um im Fall $y^{\#} > y_r$ Abhilfe zu schaffen, kann es oftmals genügen, im Messverfahren größere Messdauern bzw. Impulsanzahlen vorzuwählen, wodurch die Nachweisgrenze verkleinert wird.

7 Prüfbericht

Der Inhalt des Prüfberichts hängt ab von der jeweiligen Anwendung und den Anforderungen des Auftraggebers oder der Behörde. Unabhängig davon muss die Information erhalten bleiben, um die Daten des Prüfberichts rechtfertigen und die Nachprüfbarkeit garantieren zu können. Das erfordert folgende Angaben:

- (a) Hinweis auf die Ermittlung nach der vorliegenden Norm, z. B. DIN ISO 11929:2010;
- (b) betrachteter physikalischer Effekt, Messgröße und Modell der Auswertung;
- (c) Wahrscheinlichkeiten α und β der Fehler erster bzw. zweiter Art und ggf. Richtwert y_r ;
- (d) primäres Messergebnis y und zu y gehörende Standardunsicherheit $u(y)$;
- (e) Erkennungsgrenze y^* ;
- (f) Nachweisgrenze $y^{\#}$;
- (g) ggf. Feststellung, ob das Messverfahren für den vorgesehenen Messzweck geeignet ist oder nicht;
- (h) Feststellung, ob der physikalische Effekt erkannt ist oder nicht;

ANMERKUNG Wenn der physikalische Effekt als nicht vorliegend festgestellt wird, d. h. wenn $y < y^*$, verlangen Behörden gelegentlich, dass anstelle des Messergebnisses y der Hinweis „($< y^{\#}$)“ dokumentiert wird. Solche Dokumentation kann sinnvoll sein, wenn der Vergleich mit dem Richtwert zeigt, dass das Messverfahren für den vorgesehenen Messzweck geeignet ist.

- (i) falls physikalischer Effekt erkannt, außerdem untere Vertrauensgrenze $y^{\triangleleft}$ und obere Vertrauensgrenze $y^{\triangleright}$ mit der Wahrscheinlichkeit $1 - \gamma$ zum Vertrauensbereich, bester Schätzwert $\hat{y}$ der Messgröße und zu $\hat{y}$ gehörende Standardunsicherheit $u(\hat{y})$.

Anhang A (informativ)

Übersicht zum allgemeinen Verfahren

A.1 Aufstellung des Modells

Festlegung der nichtnegativen Messgröße Y und deren Darstellung als Funktion von Eingangsgrößen X_i (Modell; X_1 ist Bruttoeffekt; siehe 5.1 und 5.2.1):

$$Y = G(X_1, \dots, X_m) \quad (\text{A.1})$$

A.2 Vorbereitung der Eingangsdaten sowie Vorgaben

Ermittlung der Schätzwerte x_i der Eingangsgrößen X_i mit den zugehörigen Standardunsicherheiten $u(x_i)$ gemäß ISO/IEC GUIDE 98-3 (siehe auch Literaturhinweise [1], [2]) aus Messungen und Voruntersuchungen. Für eine Zählrate $X_i = \rho_i$ sind mit dem Zählergebnis n_i während der Messdauer t_i anzusetzen: $x_i = n_i/t_i$ und $u^2(x_i) = n_i/t_i^2$ (siehe 5.2.1). Speziell für den Bruttoeffekt X_1 gilt dann $u(x_1) = h_1(x_1) = \sqrt{x_1/t_1}$ (siehe 5.3.1 und A.4).

Vorgaben: Wahrscheinlichkeiten α , β und γ sowie Richtwert y_r (siehe 6.1).

A.3 Berechnung des primären Messergebnisses y mit Standardunsicherheit $u(y)$

$$y = G(x_1, \dots, x_m) \quad (\text{A.2})$$

$$u^2(y) = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial G}{\partial x_i} \right)^2 u^2(x_i) \quad (\text{A.3})$$

unter Voraussetzung unkorrelierter Eingangsgrößen X_i (siehe 5.2.1 und A.2). Anderenfalls siehe in A.2 zitierte Literatur. In $\partial G/\partial x_i$ müssen die Eingangsgrößen X_i durch die Schätzwerte $x_1, \dots, x_m$ ersetzt werden.

A.4 Berechnung der Standardunsicherheit $\tilde{u}(\tilde{y})$

Falls $u(x_1)$ als Funktion $h_1(x_1)$ bekannt ist, wird y durch $\tilde{y}$ ersetzt und Gleichung (A.2) nach x_1 aufgelöst. Bei Vorgabe von $\tilde{y}$ kann x_1 auch numerisch, z. B. mittels eines Iterationsverfahrens, aus Gleichung (A.2) berechnet werden. Das ergibt x_1 als Funktion von $\tilde{y}$ und $x_2, \dots, x_m$. Damit ist x_1 in Gleichung (A.3) und in $h_1(x_1)$ zu ersetzen, was $\tilde{u}(\tilde{y})$ statt $u(y)$ erbringt (siehe 5.3.2). Anderenfalls folgt $\tilde{u}(\tilde{y})$ als Näherung durch Interpolation aus den Daten y und $u(y)$ mehrerer Messungen (siehe 5.3.3).

A.5 Berechnung der Erkennungsgrenze y^*

$$y^* = k_{1-\alpha} \tilde{u}(0) \quad (\text{A.4})$$

Siehe 6.2. Beurteilung: Ein Effekt der Messgröße Y gilt als erkannt, wenn $y > y^*$ (siehe 6.5). Wenn nicht, entfallen A.7 und A.8.

A.6 Berechnung der Nachweisgrenze $y^\#$

Die Nachweisgrenze $y^\#$ ist die kleinste Lösung der Gleichung (A.5):

$$y^\# = y^* + k_{1-\beta} \tilde{u}(y^\#) \quad (\text{A.5})$$

Sie kann durch Iteration mit der Anfangsnäherung $y^\# = 2y^*$ berechnet werden (siehe 6.3). Beurteilung: Das Messverfahren ist für den Messzweck nicht geeignet, wenn $y^\# > y_r$ oder wenn $y^\#$ nicht existiert (siehe 6.6).

A.7 Berechnung der Vertrauensgrenzen $y^\triangleleft$ und $y^\triangleright$

$$y^\triangleleft = y - k_p u(y) \quad \text{mit} \quad p = \omega \cdot (1 - \gamma/2); \quad y^\triangleright = y + k_q u(y) \quad \text{mit} \quad q = 1 - \omega \gamma/2 \quad (\text{A.6})$$

wobei $\omega = \Phi(y/u(y))$ (siehe 6.4; zur Berechnung von ω , k_p und k_q siehe Anhang E).

A.8 Berechnung des besten Schätzwertes $\hat{y}$ der Messgröße mit Standardunsicherheit $u(\hat{y})$

$$\hat{y} = y + \frac{u(y) \exp\left\{-y^2 / [2u^2(y)]\right\}}{\omega \sqrt{2\pi}}; \quad u(\hat{y}) = \sqrt{u^2(y) - (\hat{y} - y) \hat{y}} \quad (\text{A.7})$$

(siehe 6.5).

A.9 Erstellung des Prüfberichtes

Protokollierung der Ergebnisse von A.1 bis A.8 nach Abschnitt 7.

Anhang B (normativ)

Einzelne Anwendungen

B.1 Allgemeines

Das im Hauptteil der vorliegenden Norm beschriebene Verfahren ist so allgemein, dass es eine Fülle von Anwendungen bei ähnlichen Messungen erlaubt, von denen einige wichtige im Folgenden behandelt werden. Diese Messungen unterscheiden sich von denen im Hauptteil nicht im Modell, sondern nur in der Interpretation der Eingangsgrößen X_1 bzw. X_2 und den Ansätzen für deren Schätzwerte x_1 bzw. x_2 und Standardunsicherheiten $u(x_1)$ bzw. $u(x_2)$.

Bei jeder der folgenden Anwendungen in den Anhängen B und C besteht die jeweilige Hauptaufgabe darin, das primäre Messergebnis y der Messgröße und die zugehörige Standardunsicherheit $u(y)$ nach 5.2 oder A.3 sowie die Standardunsicherheit $\tilde{u}(\tilde{y})$ als Funktion der Messgröße nach 5.3 oder A.4 zu ermitteln. Anschließend sind daraus bei allen Anwendungen auf gleiche Weise nach Abschnitt 6 oder A.5 bis A.8 die Erkennungsgrenze y^* , die Nachweisgrenze $y^\#$, die Vertrauensgrenzen y^Δ und y^∇ sowie der beste Schätzwert $\hat{y}$ der Messgröße mit der zugehörigen Standardunsicherheit $u(\hat{y})$ zu berechnen. Darauf wird im Folgenden nicht mehr hingewiesen. Numerische Beispiele zu den Anwendungen werden in Anhang D behandelt.

B.2 Zählende Messungen an bewegten Objekten

Bei zählenden Messungen an einem bewegten Objekt wird ein Messobjekt entlang einer vorgegebenen Messstrecke an einem Kernstrahlungsdetektor vorbeigeführt (oder umgekehrt). Messdaten der Messung während dieser Fahrt sind einerseits die gezählten Anzahlen n_g oder n_0 der registrierten Impulse und andererseits die Messdauern t_g bzw. t_0 . Die Messdauern können im Allgemeinen mit einer Messunsicherheit ermittelt werden, die vernachlässigbar ist gegenüber allen anderen zu berücksichtigenden Messunsicherheiten. Daher können sie als Konstanten aufgefasst werden und die Messung als eine solche mit Zeitvorwahl.

Die Reduzierung der Nulleffektzählrate durch die Abschirmwirkung des Messobjektes lässt sich mit Hilfe des Abschirmfaktors f berücksichtigen, indem in Gleichung (4) $X_3 = f$ und $X_4 = 0$ gesetzt wird. f kann als Mittelwert und die zu f gehörende Standardunsicherheit $u(f)$ als Standardabweichung des Mittelwertes aus Vorversuchen experimentell gewonnen werden oder auch aus einer Rechteckverteilung der Breite Δf über den Bereich der möglichen Werte von f als Erwartungswert bzw. als Standardabweichung $u(f) = \Delta f / \sqrt{12}$.

Im einfachsten Fall, dass das Modell in der Form $Y = X_1 - X_2 X_3 = \rho_g - \rho_0 f$ anzusetzen ist und die Messdauern t_g und t_0 vorgegeben werden, entstehen mit den Schätzwerten $x_1 = n_g/t_g = r_g$ und $x_2 = n_0/t_0 = r_0$ sowie mit $u^2(x_1) = r_g/t_g$ und $u^2(x_2) = r_0/t_0$:

$$= \frac{n_g}{t_g} - \frac{n_0}{t_0} f = r_g - r_0 f; \quad u(y) = \sqrt{\frac{r_g}{t_g} + \frac{r_0}{t_0} f^2 + r_0^2 u^2(f)} \quad (\text{B.1})$$

Durch Ersetzen von y durch $\tilde{y}$ und Eliminieren von $r_g = \tilde{y} + r_0 f$ folgt

$$\tilde{u}(\tilde{y}) = \sqrt{\frac{\tilde{y} + r_0 f}{t_g} + \frac{r_0}{t_0} f^2 + r_0^2 u^2(f)} \quad (\text{B.2})$$

wegen $u^2(x_1) = h_1^2(x_1) = x_1/t_g = r_g/t_g$.

B.3 Messungen mit Ratemetern

Als Ratemeter wird hier ein lineares, analog arbeitendes Zählratenmessgerät verstanden, bei dem sich das Ausgangssignal beim Eintreffen eines Eingangsimpulses sprunghaft (mit vernachlässigbarer Anstiegszeitkonstante) erhöht und danach exponentiell mit einer Dämpfungszeitkonstante τ bis zum Eintreffen des nächsten Eingangsimpulses abnimmt. Dabei müssen der Signalfortschritt konstant und die Dämpfungszeitkonstante von der Zählrate unabhängig sein. Auch ein digital arbeitendes Zählratenmessgerät, das das eben beschriebene simuliert, wird als hier zu betrachtendes Ratemeter aufgefasst.

Jede einzelne Messung mit einem Ratemeter muss im stationären Zustand des Ratemeters erfolgen. Das setzt voraus, dass bei der Messung des Bruttoeffektes an jeder einzelnen Probe sowie des Nulleffektes jeweils zwischen Beginn der Messung und Ablesung der Anzeige mindestens eine hinreichend festzulegende Zeitspanne verstrichen ist. Dabei entspricht eine Zeitspanne von 3τ oder 7τ nach [30] einer Abweichung der Anzeige von 5 % bzw. 0,1 % des Betrages der Differenz zwischen der Anzeige zu Beginn der Messung und der nach Ablauf der Zeitspanne abgelesenen Anzeige. Falls noch weitere unsichere Einflüsse zu berücksichtigen sind, sollte möglichst 7τ als Zeitspanne gewählt werden.

Die Erwartungswerte ρ_g und ρ_0 der Ausgangssignale des Ratemeters bei der Messung des Bruttoeffektes bzw. Nulleffektes werden als Eingangsgrößen X_1 und X_2 für die Berechnung der charakteristischen Grenzen aufgefasst: $X_1 = \rho_g$ und $X_2 = \rho_0$. Mit den zum Zeitpunkt der Messung ermittelten Werten r_g und r_0 der Ausgangssignale ergeben sich die folgenden Ansätze für die Werte der Eingangsgrößen und deren Standardunsicherheiten:

$$x_1 = r_g; \quad x_2 = r_0 \quad (\text{B.3})$$

$$u^2(x_1) = \frac{r_g}{2\tau_g}; \quad u^2(x_2) = \frac{r_0}{2\tau_0} \quad (\text{B.4})$$

In Gleichung (B.4) sind Näherungen mit einer maximalen relativen Abweichung von 5 % für $r_g \cdot \tau_g \geq 0,65$ und von 1 % für $r_g \cdot \tau_g \geq 1,32$ nach [30] angegeben. Dasselbe gilt für $r_0 \cdot \tau_0$. Die Dämpfungszeitkonstanten τ_g und τ_0 sind dementsprechend einzustellen.

Die Ratemeter-Messung ist einer zählenden Messung mit Zeitvorwahl nach 5.3.2 mit den Messdauern $t_g = 2\tau_g$ und $t_0 = 2\tau_0$ äquivalent. Dabei sind die Quotienten n_g/t_g und n_0/t_0 durch die Zählraten-Messwerte r_g bzw. r_0 der Ratemeter-Messung zu ersetzen. Dies betrifft insbesondere Gleichung (13). Siehe hierzu auch das numerische Beispiel in D.2.2. Die Standardunsicherheiten der Dämpfungszeitkonstanten kommen in den Gleichungen nicht vor und werden deshalb nicht benötigt.

Im einfachsten Fall, dass das Modell in der Form $Y = X_1 - X_2 = \rho_g - \rho_0$ anzusetzen ist, ergeben sich mit den Gleichungen (B.3) und (B.4):

$$y = r_g - r_0; \quad u(y) = \sqrt{\frac{r_g}{2\tau_g} + \frac{r_0}{2\tau_0}} \quad (\text{B.5})$$

Durch Ersetzen von y durch $\tilde{y}$ und Eliminieren von $r_g = \tilde{y} + r_0$ folgt

$$\tilde{u}(\tilde{y}) = \sqrt{\frac{\tilde{y} + r_0}{2\tau_g} + \frac{r_0}{2\tau_0}} \quad (\text{B.6})$$

wegen $u^2(x_1) = h_1^2(x_1) = x_1/(2\tau_g) = r_g/(2\tau_g)$.

B.4 Wiederholte zählende Messungen mit zufälligen Einflüssen

B.4.1 Allgemeines

Zufällige Einflüsse, z. B. durch Probenbehandlung und Geräte, verursachen Messabweichungen, die von Probe zu Probe unterschiedlich sein können. Deshalb werden in solchen Fällen die Zählergebnisse n_i der Zählungen an mehreren Proben eines zu untersuchenden radioaktiven Materials, an mehreren Blindproben und an mehreren Referenzproben aus radioaktiv markiertem Blindprobenmaterial oder Standardreferenzmaterial jeweils gemittelt, um daraus für die Eingangsgrößen X_1 und X_2 geeignete Schätzwerte x_1 bzw. x_2 sowie Standardunsicherheiten $u(x_1)$ bzw. $u(x_2)$ zu gewinnen. Dementsprechend ist X_1 als mittlere Bruttozählrate und X_2 als mittlere Nulleffektzählrate zu betrachten. Auch die Messgröße Y mit dem gesuchten wahren Wert $\tilde{y}$ ist deshalb als gemittelte Größe aufzufassen, z. B. als mittlere Nettozählrate oder mittlere Aktivität der Proben. Die Formelzeichen zu den Zählungen an den Proben, den Blindproben und den Referenzproben werden im Folgenden durch den Index g bzw. 0 bzw. r gekennzeichnet, arithmetische Mittelung über jeweils m Zählungen, die unter Vorwahl der gleichen Messdauer t (Zeitvorwahl) durchgeführt werden, durch Überstreichen. Für m zu mittelnde Zählungen n_i ($i = 1, \dots, m$; $m > 1$), die auf diese Weise gewonnen werden, sind der Mittelwert $\bar{n}$ und die empirische Varianz s^2 der Werte n_i gegeben durch

$$\bar{n} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m n_i; \quad s^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (n_i - \bar{n})^2 \quad (\text{B.7})$$

Die folgenden Verfahren sind Näherungen für hinreichend große Zählergebnisse $n_i \gg 1$ und $\bar{n} \ll s^2$, die es erlauben, die zufälligen Einflüsse neben denen der Poisson-Statistik zu erkennen (siehe auch unter Gleichung (B.12)).

Ein numerisches Beispiel einer Messung mit zufälligen Einflüssen ist in D.3 beschrieben.

B.4.2 Verfahren bei unbekannten Einflüssen

Bei unbekannten Einflüssen sind für die mittlere Bruttozählrate X_1 und für die mittlere Nulleffektzählrate X_2 anzusetzen:

$$x_1 = \bar{n}_g / t_g; \quad x_2 = \bar{n}_0 / t_0 \quad (\text{B.8})$$

$$u^2(x_1) = s_g^2 / (m_g t_g^2); \quad u^2(x_2) = s_0^2 / (m_0 t_0^2) \quad (\text{B.9})$$

Mit den Ansätzen nach den Gleichungen (B.8) und (B.9) folgen aus den Gleichungen (6) und (9):

$$y = \left(\frac{\bar{n}_g}{t_g} - \frac{\bar{n}_0}{t_0} x_3 - x_4 \right) \cdot w \quad (\text{B.10})$$

$$u(y) = \sqrt{w^2 \left[\frac{s_g^2}{m_g t_g^2} + x_3^2 \frac{s_0^2}{m_0 t_0^2} + (\bar{n}_0 / t_0)^2 \cdot u^2(x_3) + u^2(x_4) \right] + y^2 u_{\text{rel}}^2(w)} \quad (\text{B.11})$$

Hier liegt $u^2(x_1)$ nicht als Funktion $h_1^2(x_1)$ von x_1 vor. Deshalb muss $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ nach 5.3.3 durch Näherung ermittelt werden, z. B. nach Gleichung (19), wobei als y_1 das aktuelle Ergebnis y benutzt werden kann. Für diesen Zweck ist bei der Berechnung von $\tilde{u}^2(0)$, d. h. für $\tilde{y} = 0$, der fehlende Wert für s_g^2 / t_g^2 durch s_0^2 / t_0^2 zu ersetzen, zumal diese beiden Werte aus den Schätzungen für Varianzen der gleichen Verteilungen von Zählraten gebildet werden, unabhängig von t_g , t_0 , m_g und m_0 .

B.4.3 Verfahren bei bekannten Einflüssen

Ein anderes Vorgehen, das sich bei geringen zufälligen Einflüssen anbietet, beruht auf dem Ansatz

$$s^2 = \bar{n} + g^2 \bar{n}^2 \quad (\text{B.12})$$

Der erste Term $\bar{n}$ in Gleichung (B.12) folgt aus den Poisson-Verteilungen der Impulsanzahlen n_i bei verschwindenden zufälligen Einflüssen. Diese Einflüsse beschreibt der zweite Term $g^2 \bar{n}^2$ unter der Annahme einer empirischen relativen Standardabweichung g für die Daten aller Proben aufgrund jener Einflüsse. Dieser Einflussparameter g lässt sich durch Zählungen an Referenzproben aus Gleichung (B.12) durch Gleichsetzung mit Gleichung (B.7) berechnen:

$$g^2 = (s_r^2 - \bar{n}_r) / \bar{n}_r^2 \quad (\text{B.13})$$

Als Daten der Zählungen an Referenzproben können auch solche an anderen Proben herangezogen werden, die früher nicht eigens für Referenzzwecke, aber unter ähnlichen Bedingungen wie Referenzproben untersucht worden sind.

Wenn sich $g^2 < 0$ ergibt, sind der Ansatz und die Daten nicht miteinander verträglich. Dann sollte die Anzahl m_r der Referenzproben vergrößert oder $g = 0$ gesetzt werden. Auch sollte $g < 0,2$ sein. Anderenfalls kann nach B.4.2 vorgegangen werden.

Statt Gleichung (B.9) gelten nun mit Gleichung (B.12):

$$u^2(x_1) = (\bar{n}_g + g^2 \bar{n}_g^2) / (m_g t_g^2); \quad u^2(x_2) = (\bar{n}_0 + g^2 \bar{n}_0^2) / (m_0 t_0^2) \quad (\text{B.14})$$

Die Fälle $m_g = 1$ und $m_0 = 1$ sind hier zugelassen. Mit $x_1 = \bar{n}_g / t_g$ und Gleichung (B.14) liegt daher $u^2(x_1)$ als Funktion von x_1 vor:

$$u^2(x_1) = \bar{n}_g^2 (x_1 / t_g + g^2 x_1^2) / m_g \quad (\text{B.15})$$

Die Gleichungen (B.8) und (B.10) bleiben gültig für $x_3 = 1$ mit $u(x_3) = 0$ und $x_4 = 0$ mit $u(x_4) = 0$. Weiterhin folgt nach Gleichung (9)

$$u(y) = \sqrt{w^2 \cdot [u^2(x_1) + u^2(x_2)] + y^2 u_{\text{rel}}^2(w)} \quad (\text{B.16})$$

Um $\tilde{u}(\tilde{y})$ zu berechnen, wird y durch $\tilde{y}$ ersetzt, und Gleichung (B.10) wird nach $x_1 = \bar{n}_g / t_g$ aufgelöst, was $x_1 = \tilde{y} / w + \bar{n}_0 / t_0$ erbringt. Dieses im aktuellen Fall so ermittelte x_1 ist in Gleichung (B.15) einzusetzen und das dadurch gewonnene $u^2(x_1)$ in Gleichung (B.16), was schließlich zu $\tilde{u}(\tilde{y})$ führt (siehe auch 5.3):

$$\tilde{u}(\tilde{y}) = \sqrt{\tilde{y}^2 \left(\frac{g^2}{m_g} + u_{\text{rel}}^2(w) \right) + \frac{\tilde{y} w}{m_g} \left(\frac{2 \bar{n}_0 g^2}{t_0} + \frac{1}{t_g} \right) + w^2 \left(\frac{\bar{n}_0}{m_g t_0 t_g} + \frac{\bar{n}_0^2 g^2}{m_g t_0^2} + \frac{\bar{n}_0 + g^2 \bar{n}_0^2}{m_0 t_0^2} \right)} \quad (\text{B.17})$$

Die Bedingung nach Gleichung (17) ist hier zu ersetzen durch die Bedingung

$$k_{1-\beta} \cdot \sqrt{\frac{g^2}{m_g} + u_{\text{rel}}^2(w)} < 1 \quad (\text{B.18})$$

B.5 Zählende Messungen an Filtern während der Anreicherung radioaktiver Stoffe

B.5.1 Allgemeines

Bei der Überwachung strömender fluider Medien (Gas oder Flüssigkeit, z. B. Fortluft oder Raumluft einer kerntechnischen Anlage oder Wasser) wird fortlaufend eine zählende Messung an einem Filter während der Anreicherung radioaktiver Stoffe aus dem Medium durchgeführt. Die Messung besteht aus einer Folge zeitlich aneinander anschließender Messintervalle gleicher Dauer t . Es wird vorausgesetzt, dass die Halbwertszeit der im Filter angereicherten Nuklide groß ist gegen die Gesamtdauer aller Messintervalle, deren Daten für die folgende Berechnung der charakteristischen Grenzen verwendet werden. Auch wird angenommen, dass der Nulleffekt während dieser Zeit konstant bleibt. Zwei Messgrößen Y sind von Interesse:

- (a) die volumenbezogene Aktivität $A_{V,j}$ (Aktivität geteilt durch Probenvolumen, siehe ISO 31-9) der im Messintervall j während der Dauer t vom Medium mitgeführten, im Filter angereicherten und gemessenen radioaktiven Nuklide [Fall a), siehe B.5.2] und
- (b) die Änderung $\Delta A_{V,j}$ der volumenbezogenen Aktivität nach Fall a), verglichen mit der mittleren volumenbezogenen Aktivität $\bar{A}_{V,j}$ aus m vorangegangenen Messintervallen [Fall b), siehe B.5.3].

Es genügt für die Fälle a) und b), das Modell nach 5.2 aufzustellen, das die jeweilige Messgröße $Y = A_{V,j}$ bzw. $Y = \Delta A_{V,j}$ als Funktion von Eingangsgrößen X_i beschreibt, und die Schätzwerte x_i mit den zugehörigen Standardunsicherheiten $u(x_i)$ der Eingangsgrößen X_i anzusetzen. Alles Weitere erfolgt dann nach 5.2.2, 5.3.2 und Abschnitt 6 und analog zu B.2 und B.3. Ein numerisches Beispiel ist in D.4 beschrieben.

Die Aktivität wird auf das Volumen V des durch das Filter während der Messdauer t strömenden Mediums bezogen. Dieses Volumen V mit der zugehörigen Standardunsicherheit $u(V)$ und ein zu berücksichtigender Kalibrierfaktor ε mit der zugehörigen Standardunsicherheit $u(\varepsilon)$ seien aus Voruntersuchungen bekannt. Es wird angenommen, dass die Effektivität des Filters in ε enthalten ist. Die Standardunsicherheit $u(t)$ der Messdauer t wird vernachlässigt, weil t wesentlich genauer als alle anderen beteiligten Größen gemessen und deshalb als Konstante angesehen werden kann.

B.5.2 Volumenbezogene Aktivität als Messgröße

Im Fall a) ist $Y = A_{V,j}$ die Messgröße im Messintervall j . Die Eingangsgrößen X_i werden wie folgt angesetzt: $X_1 = \rho_j$, $X_2 = \rho_{j-1}$, $X_5 = \varepsilon$ und $X_7 = V$. Hierbei ist ρ_j die Zählrate des Bruttoeffektes im Messintervall j . Weitere Eingangsgrößen kommen nicht vor, sie werden konstant 0 für X_4 und sonst gleich 1 ohne Unsicherheit gesetzt. Das Modell lautet nun nach Gleichung (4):

$$Y = A_{V,j} = \frac{X_1 - X_2}{X_5 X_7} = \frac{\rho_j - \rho_{j-1}}{\varepsilon V} \quad (\text{B.19})$$

Wegen des als konstant angenommenen Nulleffektes heben sich dessen Beiträge in der Differenz auf.

Ähnlich wie in 5.2.2 werden die Schätzwerte x_1 und x_2 mit den zugehörigen Standardunsicherheiten $u(x_1)$ bzw. $u(x_2)$ der Eingangsgrößen X_1 bzw. X_2 wie folgt angesetzt, wobei n_j die Anzahl der im Messintervall j registrierten Ereignisse ist:

$$x_1 = r_j = n_j / t; \quad u^2(x_1) = r_j / t \quad (\text{B.20})$$

$$x_2 = r_{j-1} = n_{j-1} / t; \quad u^2(x_2) = r_{j-1} / t \quad (\text{B.21})$$

Offensichtlich ist $u(x_1)$ dadurch als Funktion $h_1(x_1)$ von x_1 bekannt, die für die Erkennungsgrenze und Nachweisgrenze benötigt wird, denn es gilt

$$u(x_1) = \sqrt{r_j / t} = h_1(x_1) = \sqrt{x_1 / t} \quad (\text{B.22})$$

Mit den vorstehenden Ansätzen und $w = 1/(\varepsilon V)$ mit $u_{\text{rel}}^2(w) = u^2(\varepsilon)/\varepsilon^2 + u^2(V)/V^2$ entstehen nun nach 5.2.2 und 5.3.2:

$$y = \frac{x_1 - x_2}{x_5 x_7} = \frac{r_j - r_{j-1}}{\varepsilon V} \quad (\text{B.23})$$

$$\begin{aligned} u(y) &= \sqrt{w^2 \cdot [u^2(x_1) + u^2(x_2)] + y^2 u_{\text{rel}}^2(w)} \\ &= \frac{1}{\varepsilon V} \sqrt{\frac{r_j + r_{j-1}}{t} + (r_j - r_{j-1})^2 \left[\frac{u^2(\varepsilon)}{\varepsilon^2} + \frac{u^2(V)}{V^2} \right]} \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Mit y ersetzt durch $\tilde{y}$ wird mit den Gleichungen (B.24) und (12):

$$x_1 = r_j = \tilde{y}/w + x_2 = \tilde{y} \varepsilon V + r_{j-1} \quad (\text{B.25})$$

$$\begin{aligned} \tilde{u}(\tilde{y}) &= \sqrt{w^2 \cdot [h_1^2(\tilde{y}/w + x_2) + u^2(x_2)] + \tilde{y}^2 u_{\text{rel}}^2(w)} \\ &= \sqrt{\frac{(\tilde{y} \varepsilon V + x_2)/t + u^2(x_2)}{(\varepsilon V)^2} + \tilde{y}^2 \cdot \left[\frac{u^2(\varepsilon)}{\varepsilon^2} + \frac{u^2(V)}{V^2} \right]} \\ &= \sqrt{\frac{\tilde{y} \varepsilon V + 2r_{j-1}}{(\varepsilon V)^2 t} + \tilde{y}^2 \cdot \left[\frac{u^2(\varepsilon)}{\varepsilon^2} + \frac{u^2(V)}{V^2} \right]} \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

B.5.3 Änderung der volumenbezogenen Aktivität als Messgröße

Der Fall b) unterscheidet sich von dem in B.5.2 behandelten Fall a) lediglich durch eine andere Definition von X_2 . Das Modell lautet:

$$\begin{aligned} Y = \Delta A_{V,j} &= A_{V,j} - \bar{A}_{V,j} = \frac{X_1 X_2}{X_5 X_7} \\ &= \frac{1}{\varepsilon V} \left(\rho_j - \rho_{j-1} - \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m (\rho_{j-k} - \rho_{j-k-1}) \right) = \frac{1}{\varepsilon V} \left(\rho_j - \left(1 + \frac{1}{m}\right) \rho_{j-1} + \frac{1}{m} \rho_{j-m-1} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

Statt $X_2 = \rho_{j-1}$ gilt also nun mit $X_1 = \rho_j$:

$$X_2 = \left(1 + \frac{1}{m}\right) \rho_{j-1} - \frac{1}{m} \rho_{j-m-1} \quad (\text{B.28})$$

Daraus folgen

$$x_2 = \left(1 + \frac{1}{m}\right) r_{j-1} - \frac{1}{m} r_{j-m-1}; \quad u^2(x_2) = \left(1 + \frac{1}{m}\right)^2 \frac{r_{j-1}}{t} + \frac{r_{j-m-1}}{m^2 t} \quad (\text{B.29})$$

Die nach Gleichung (B.29) berechneten Werte x_2 und $u^2(x_2)$ sind in die Gleichungen (B.23) bis (B.26) einzusetzen, um y , $u(y)$ und $\tilde{u}(\tilde{y})$ zu erhalten.

Das Modell nach Gleichung (B.27) gilt für die Prüfung auf Zunahme der volumenbezogenen Aktivität. Soll auf deren Abnahme geprüft werden, ist $Y = \bar{A}_{V,j} - A_{V,j}$ als Messgröße anzusetzen, d. h. X_1 und X_2 sind zu vertauschen, damit die Messgröße wie verlangt nichtnegativ wird.

Anhang C (normativ)

Anwendungen bei zählenden spektrometrischen Messungen

C.1 Allgemeines

Die vorliegende Norm kann auch bei zählenden spektrometrischen Messungen angewendet werden, wenn eine einzelne Linie in einem gemessenen Vielkanal-Spektrum zu betrachten und keine Ausgleichsrechnung, z. B. Entfaltung, durchzuführen ist. Zunächst wird die Nettointensität der Linie nach C.1 bis C.3 durch Abtrennung des Untergrundes ermittelt und danach, wenn eine andere Messgröße, z. B. eine Aktivität, zu berechnen ist, weiter nach 5.2 und 5.3 verfahren (siehe C.4). Als Untergrund in zählenden spektrometrischen Messungen ist der Kanalinhalt im Bereich einer zu betrachtenden Linie zu verstehen, der ohne Interesse für die zu betrachtende Linie in dem Spektrum ist. Der Untergrund kann von der natürlichen Umgebungsstrahlung, aber auch von der Probe selbst (z. B. von anderen Linien) kommen.

Ausgewählten Kanälen eines gemessenen Vielkanal-Spektrums – ggf. können die Kanäle von Kanalbereichen des Spektrums jeweils zu einem Kanal zusammengefasst sein – mit den Inhalten n_i der Kanäle (oder Kanalbereiche) werden die unabhängigen, Poisson-verteilten Zufallsvariablen N_i ($i = 1, \dots, m$ sowie $i = g$) zugeordnet und deren Erwartungswerten die Eingangsgrößen X_i (siehe F.1). Im Folgenden ist $\mathcal{G}_i$ die untere, $\mathcal{G}'_i$ die obere Grenze des Kanals i ; $\mathcal{G}$ ist z. B. Energie oder Zeit oder eine andere der Kanalnummer zugeordnete kontinuierliche SkalenvARIABLE. Die Kanalbreite $t_i = \mathcal{G}'_i - \mathcal{G}_i$ entspricht t nach F.1. Mit der mittleren spektralen Dichte ρ_i im Kanal i ist somit $X_i = \rho_i t_i$, und $x_i = n_i$ ist Schätzwert von X_i , wozu die Standardunsicherheit $u(x_i) = \sqrt{n_i}$ von x_i gehört. Für $i = g$ repräsentieren n_g und $X_g = \rho_g t_g$ die zusammengefassten Kanäle einer betrachteten Linie im Spektrum. Messgröße Y mit dem wahren Wert $\tilde{y}$ ist die Nettointensität der Linie, d. h. der Erwartungswert des Nettoinhalts des Kanals $i = g$ (Bereich B , siehe C.2). (Zur zweckmäßigen Festlegung von Kanalbereichen siehe C.3.)

Zunächst muss der Untergrund der betrachteten Linie ermittelt werden, wozu auch die Beiträge der Ausläufer störender Linien gerechnet werden. Eine geeignete die spektrale Dichte des Untergrundes der Linie darstellende Funktion $H(\mathcal{G}; a_1, \dots, a_m)$ mit den Parametern a_k wird so gelegt, dass

$$n_i = \int_{\mathcal{G}_i}^{\mathcal{G}'_i} H(\mathcal{G}; a_1, \dots, a_m) d\mathcal{G}; \quad (i = 1, \dots, m) \quad (\text{C.1})$$

woraus die a_k als Funktionen der n_i zu berechnen sind. Der Untergrundbeitrag zur Linie ist dann

$$z_0 = \int_{\mathcal{G}_g}^{\mathcal{G}'_g} H(\mathcal{G}; a_1, \dots, a_m) d\mathcal{G} \quad (\text{C.2})$$

Die Zufallsvariable Z_0 zum Untergrundbeitrag z_0 ist implizit eine Funktion der Eingangsgrößen X_i , weil z_0 aus den $x_i = n_i$ berechnet wird. Der Modellansatz für die Messgröße Y lautet somit

$$Y = G(X_g, X_1, \dots, X_m) = X_g - Z_0 \quad (\text{C.3})$$

woraus

$$y = n_g - z_0; \quad u^2(y) = n_g + u^2(z_0); \quad u^2(z_0) = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{k=1}^m \frac{\partial z_0}{\partial a_k} \frac{\partial a_k}{\partial n_i} \right)^2 n_i \quad (\text{C.4})$$

folgen. Die eingeklammerte Summe ist gleich $\partial z_0 / \partial n_i$. Zur Berechnung der Funktion $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ wird zunächst der Nettoinhalt $\tilde{y}$ von Kanal g vorgegeben. Dann wird y in Gleichung (C.4) durch $\tilde{y}$ ersetzt. Dadurch kann n_g eliminiert werden, das bei Vorgabe von $\tilde{y}$ nicht vorliegt. Das ergibt $n_g = \tilde{y} + z_0$ und

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = \tilde{y} + z_0 + u^2(z_0) \quad (\text{C.5})$$

Die charakteristischen Grenzen nach Abschnitt 6 folgen dann aus den Gleichungen (C.4) und (C.5).

Wenn der in den a_k lineare Ansatz

$$H(\vartheta) = \sum_{k=1}^m a_k \psi_k(\vartheta) \quad (\text{C.6})$$

mit gegebenen Funktionen $\psi_k(\vartheta)$ verwendet wird, ist Gleichung (C.1) ein lineares Gleichungssystem für die a_k . Dadurch hängen die a_k linear und die partiellen Ableitungen in Gleichung (C.4) nicht von den n_i ab. Dann ist

$$u^2(z_0) = \sum_{i=1}^m b_i^2 n_i \quad (\text{C.7})$$

mit Größen b_i , die nicht von den n_i abhängen. Gleichung (C.7) folgt auch, wenn der Untergrundbeitrag z_0 zur Linie mit geeignet vorgegebenen Koeffizienten b_i linear aus den Kanalinhälen n_i berechnet wird:

$$z_0 = \sum_{i=1}^m b_i n_i \quad (\text{C.8})$$

C.2 Anwendung je nach Verlauf des Untergrundes

Sollen Ereignisse einer einzelnen Linie mit bekannter Lage im Spektrum nachgewiesen werden, so sind die folgenden Fälle des Untergrundverlaufs als Funktion von ϑ und zugehörigen Ansätze zu unterscheiden:

- Konstanter Untergrund: Ansatz $H(\vartheta) = a_1$ (Konstante, $m = 1$).
- Linearer Untergrund, der häufig bei Gammastrahlung vorausgesetzt werden kann: Ansatz $H(\vartheta) = a_1 + a_2 \vartheta$ (Gerade, $m = 2$).
- Schwach gekrümmter Untergrund bei störenden Nachbarlinien: Ansatz $H(\vartheta) = a_1 + a_2 \vartheta + a_3 \vartheta^2 + a_4 \vartheta^3$ (kubische Parabel, $m = 4$).
- Stark gekrümmter Untergrund, der bei stark überlappenden Linien vorkommt, z. B. bei Alphastrahlung: Ansatz nach Gleichung (C.6).

In den Fällen a), b) und c) wird im Folgenden vorausgesetzt, dass die SkalenvARIABLE ϑ der Kanalnummer linear zugeordnet ist.

In den Fällen a) und b) ist es für die Ermittlung des Untergrundes zweckmäßig, drei Kanalbereiche A_1 , B und A_2 , die in dieser Reihenfolge aneinander anschließen, auf folgende Weise festzulegen.

Der Bereich B umfasst alle zur Linie zu rechnenden Kanäle, besitzt den Gesamtinhalt n_g und die Breite t_g . Kann die Linienform als Gaußkurve mit der Halbwertsbreite h angenommen werden, so ist der Bereich B möglichst symmetrisch über die Linie zu legen. Es sollte

$$t_g \approx 2,5 h \quad (\text{C.9})$$

gewählt werden, wenn Schwankungen der Kanalzuordnung nicht ausgeschlossen werden können, und auch bei nicht dominierendem Untergrund, z. B. bei ausgeprägten Linien. Bei dominierendem Untergrund ist als günstigste Breite des Bereichs B

$$t_g \approx 1,2 h \quad (\text{C.10})$$

anzusetzen. Der Bereich B überdeckt dann etwa den Anteil $f = 0,84$ der Linienfläche (siehe auch C.4). Allgemein ist $f = 2 \Phi(\nu \sqrt{2 \ln 2}) - 1$, wenn $t_g = \nu h$ mit einem Faktor ν angesetzt wird.

Die Halbwertsbreite h ist grundsätzlich aus dem Auflösungsvermögen der Messeinrichtung oder unter gleichen Messbedingungen mittels einer Referenzprobe, die die zu untersuchende Linie genügend stark

emittiert, oder aus Nachbarlinien mit vergleichbarer Form und Breite zu ermitteln. Der Bereich B muss eine ganze Zahl von Kanälen umfassen, deshalb ist t_g dahingehend aufzurunden.

Die an den Bereich B unterhalb und oberhalb anschließenden Bereiche A_1 und A_2 müssen nur im Fall b) von gleicher Breite $t = t_1 = t_2$ festgelegt werden. Ihre Gesamtbreite $t_0 = t_1 + t_2 = 2t$ ist möglichst groß zu wählen, aber nur höchstens so groß, dass der Verlauf des Untergrundes über alle Bereiche noch als näherungsweise konstant [Fall a)] bzw. linear [Fall b)] angesehen werden kann. n_1 und n_2 sind die Gesamtkanalinhalte der Bereiche A_1 bzw. A_2 , weiterhin ist $n_0 = n_1 + n_2$.

Dann ergeben sich für die Fälle a) und b):

$$z_0 = c_0 n_0; \quad u^2(z_0) = c_0^2 n_0; \quad c_0 = t_g / t_0 \quad (\text{C.11})$$

$\tilde{u}^2(\tilde{y})$ folgt aus Gleichung (C.5).

Im Fall c) sind stattdessen fünf Kanalbereiche A_1, A_2, B, A_3 und A_4 in dieser Reihenfolge aneinander anschließend wie oben beschrieben mit gleicher Breite t der Bereiche A_i festzulegen (siehe Bild C.1). Mit der Summe $n_0 = n_1 + n_2 + n_3 + n_4$ der Gesamtkanalinhalte n_i der Bereiche A_i und deren Gesamtbreite $t_0 = 4t$ sowie mit der Hilfsgröße $n'_0 = n_1 - n_2 - n_3 + n_4$ gelten dann:

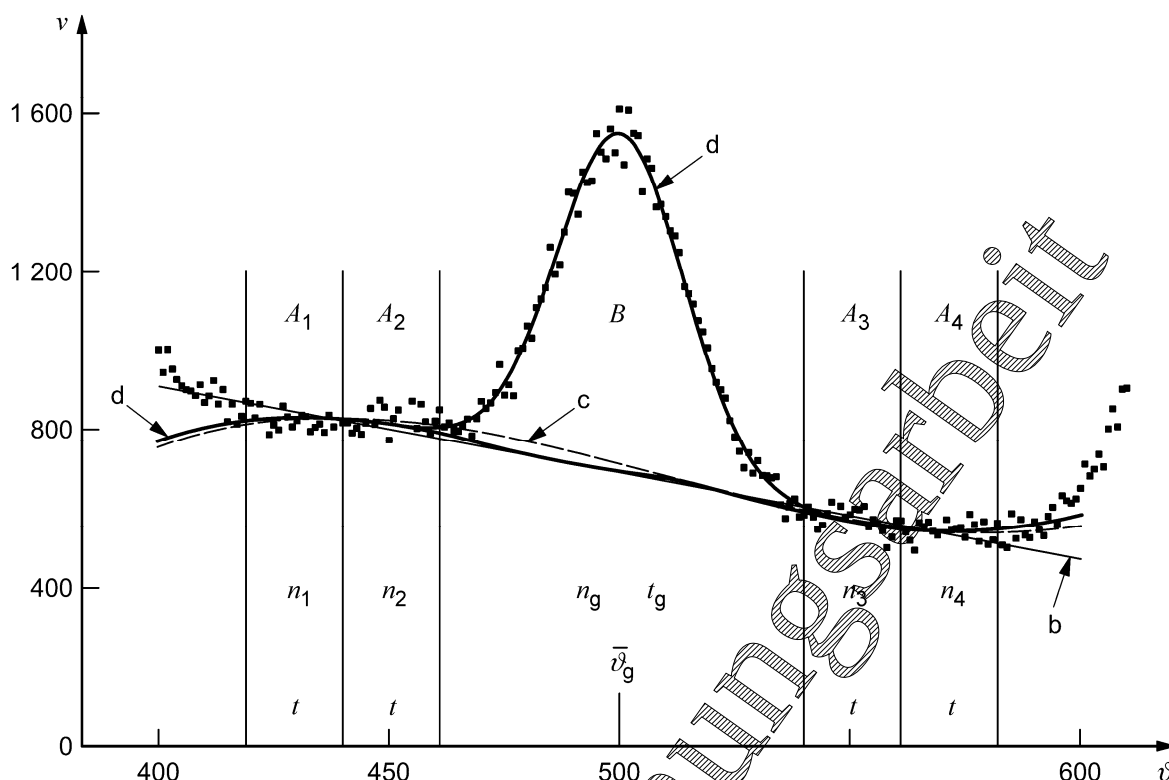
$$\begin{aligned} z_0 &= c_0 n_0 - c_1 n'_0; \quad u^2(z_0) = (c_0^2 + c_1^2) n_0 - 2 c_0 c_1 n'_0 \\ c_0 &= t_g / t_0; \quad c_1 = c_0 \cdot (4/3 + 4 c_0 + 8 c_0^2 / 3) / (1 + 2 c_0) \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

und $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ folgt aus Gleichung (C.5). Zwei numerische Beispiele zu Fall c) sind in D.5 behandelt.

Im Fall d) sind auf gleiche Weise m Bereiche A_i aneinander anschließend festzulegen, wovon je etwa die Hälfte unterhalb und oberhalb des Bereichs B anzuordnen sind. Die Bereiche A_i brauchen nicht die gleiche Breite aufzuweisen. Als Funktionen $\psi_k(\mathcal{G})$ sind zum Teil wie oben die Potenzfunktionen $\mathcal{G}^{k-1}$, aber auch, soweit möglich und bekannt, die funktionalen Verläufe der zu berücksichtigenden störenden Nachbarlinien anzusetzen. Danach ist nach C.1 zu verfahren, und $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ folgt wieder aus Gleichung (C.5).

Nachdem in allen Fällen $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ nach Gleichung (C.5) berechnet ist, ergeben sich damit und mit Gleichung (C.4) und nach Abschnitt 6 die charakteristischen Grenzen.

Bild C.1 zeigt das Schema der Anordnung der Kanalbereiche A_i ($i = 1, 2, 3, 4$) im Vielkanal-Spektrum zur Ermittlung eines schwach gekrümmten Untergrundes einer Linie im Bereich B [Fall c)]. Die Bereiche A_i haben den Inhalt n_i und die gleiche Breite t . Bereich B hat den Inhalt n_g und die Breite $t_g = 2,5h$ mit der Halbwertsbreite h . Die Abszisse $\mathcal{G}$ ist der Kanalnummer zugeordnet, z. B. Energie oder Zeit, und $\bar{\mathcal{G}}$ ist ihr Wert in der Mitte des Bereiches B . Die Ordinate v bezeichnet den Zählinhalt der einzelnen Kanäle. Bei konstantem oder linearem Untergrund werden nur zwei Bereiche A_i in der Anordnung A'_1, B, A'_2 benötigt [Fälle a) und b)]. Gerade b und kubische Parabel c stellen die nach C.3 für die Fälle b) bzw. c) ermittelten Verläufe des Untergrundes der Linie im Spektrum dar. Für Fall b) wurden die Bereiche A_1 und A_2 zu A'_1 mit der Breite $2t$ sowie entsprechend die Bereiche A_3 und A_4 zu A'_2 zusammengefasst. Gerade b erfüllt die Chi-Quadrat-Bedingung nicht (siehe D.5). Linie d: entfaltetes Spektrum der Bereiche A_i und B und dazugehöriger Untergrund nach C.5 (siehe D.5.3). In dem dargestellten Beispiel liegen die Untergrund-Linien b und d in dem Bereich B sehr dicht zusammen.



Legende

g Parameter des Spektrums (z. B. Energie oder Zeit)

v Zählinhalt jedes Kanals

Kurven b, c d siehe Text.

Bild C.1 – Anordnung der Kanalbereiche zur Ermittlung des Untergrundes einer Linie

C.3 Festlegung der Bereiche zur Ermittlung des Untergrundes

Die Festlegung der Bereiche A_i zur Ermittlung des Untergrundes kann über eine Prüfung erfolgen, ob der Verlauf des Untergrundes in den Bereichen durch die Funktion $H(g)$ darstellbar ist. Zu diesem Zweck wird mit der Gesamtanzahl $M > m$ aller einzelnen Kanäle der Bereiche A_i , mit dem Zählinhalt v_j des Kanals j ($j = 1, \dots, M$) dieser Bereiche, mit dem der Mitte des Kanals j zugeordneten Wert $\bar{g}_j$ der SkalenvARIABLE g sowie mit der Kanalbreite Δg die Prüfgröße

$$\chi^2 = \sum_{j=1}^M \frac{[H(\bar{g}_j; a_1, \dots, a_m) \Delta g_j - v_j]^2}{v_j + 1} \quad (C.13)$$

gebildet und dann festgestellt, ob

$$|\chi^2 - M + m| \leq k_{1-\delta/2} \sqrt{2(M - m)} \quad (C.14)$$

ist. Als Fehlerwahrscheinlichkeit wird $\delta = 0,05$ empfohlen. Ist die Chi-Quadrat-Bedingung nach Gleichung (C.14) für die Verträglichkeit der Funktion $H(g)$ mit dem gemessenen Verlauf des Untergrundes in den Bereichen A_i des Spektrums erfüllt oder nicht erfüllt, so sind die Bereiche A_i und damit M zu vergrößern bzw. zu verkleinern, und die Prüfung ist so lange zu wiederholen, bis maximale mit der Bedingung noch verträgliche Bereiche gefunden sind.

Werden Funktionswerte $H(g)$ in den Bereichen A_i und B negativ, so ist das Verfahren in der hier beschriebenen Form nicht anwendbar. Zum Nenner $v_j + 1$ in Gleichung (C.13) siehe unter Gleichung (F.1).

In den nachfolgenden Fällen a) bis c) kann die Funktion $H(g)$ explizit angegeben werden:

$$\text{Fall a)} \quad H(g) = \frac{n_0}{t_0} \quad (\text{C.15})$$

$$\text{Fall b)} \quad H(g) = \frac{n_0}{t_0} + \frac{4(n_2 - n_1)(g - \bar{g}_g)}{t_0(2t_g + t_0)} \quad (\text{C.16})$$

$$\text{Fall c)} \quad H(g) = a_1 + a_2(g - \bar{g}_g) + a_3(g - \bar{g}_g)^2 + a_4(g - \bar{g}_g)^3 \quad (\text{C.17})$$

Dabei ist $\bar{g}_g$ der der Mitte des Bereichs B zugeordnete Wert von g . Weiterhin sind

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{n_0}{t_0} - \frac{4n'_0(t_g^2 + t_g t_0 + t_0^2/3)}{t_0^2(2t_g + t_0)}; \quad a_2 = 16 \frac{n_3 - n_2}{t_0(4t_g + t_0)} - \frac{a_4}{32} [(2t_g + t_0)^2 + (2t_g)^2] \\ a_3 &= \frac{16n'_0}{t_0^2(2t_g + t_0)}; \quad a_4 = 256 \frac{(n_4 - n_1)(4t_g + t_0) - (n_3 - n_2)(4t_g + 3t_0)}{t_0^2(4t_g + t_0)(4t_g + 2t_0)(4t_g + 3t_0)} \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

Als numerisches Beispiel zeigt Bild C.1 den Ausschnitt eines Vielkanal-Spektrums, das mittels eines NaI-Detektors registriert wurde, mit den Verläufen des Untergrundes, die nach den Fällen b) und c) berechnet wurden. Weiteres dazu siehe D.5.2.

C.4 Weiterführende Anwendung

Häufig ist aus der nach C.1 und C.2 gewonnenen Nettointensität der Linie im Verein oder Vergleich mit weiteren Größen (z. B. Kalibrier-, Korrekptions- oder Einflussgrößen oder Umrechnungsfaktoren wie Probenmasse, Emissions- oder Ansprechwahrscheinlichkeit) eine andere interessierende Messgröße zu berechnen. Das kann z. B. eine (volumenbezogene) Aktivität sein oder der Quotient der Nettointensität der Linie und der Nettointensität einer Referenzlinie im selben Spektrum oder der Nettointensität derselben Linie in einem Referenzspektrum. In solchen Fällen ist im Anschluss an die Berechnungen nach C.1 und C.2 im Wesentlichen nach 5.2 und 5.3 wie folgt vorzugehen.

In 5.2 und 5.3 kommen die interessierende Messgröße Y und die Eingangsgrößen X_i vor. Sie sind nach den folgenden Gleichungen anzusetzen, wobei jeweils auf der linken Seite eine der vorgenannten Größen und auf der rechten Seite die entsprechende Größe nach C.1 steht.

Ist Y eine (volumenbezogene) Aktivität oder analoge Größe, so werden $X_1 = X_g$, $X_2 = Z_0$ und $X_3 = 1$ sowie $x_5 = 1$ oder 0,84 und $u(x_5) = 0$, wenn Gleichung (C.9) bzw. Gleichung (C.10) verwendet wird, und weitere Eingangsgrößen X_i als Umrechnungsfaktoren angesetzt.

Ist $Y = Y_1/Y_2$ der Quotient der nach C.1 und C.2 ermittelten Nettointensität Y_1 einer Linie und der ebenso ermittelten Nettointensität Y_2 einer Referenzlinie in demselben oder einem anderen Spektrum, so werden $X_1 = Y_1$, $X_2 = 0$ und $X_5 = X_2$ angesetzt.

Zur Korrektur einer spektrometrischen Überlagerung der interessierenden Linie durch eine störende Linie L gleicher Energie eines anderen Nuklids ist ähnlich wie im vorangehenden Absatz zu verfahren. Dann ist $X_1 = Y_1$ die Netto-Intensitätssumme beider Linien und $X_2 = Y_2$ die Nettointensität einer als Referenz dienenden Linie des störenden Nuklids. Unter der Voraussetzung, dass das Spektrum dieses Nuklids frei von der interessierenden Linie gesondert gemessen werden kann, z. B. an einer Blindprobe, sind zwei Fälle zu unterscheiden. Im ersten Fall dient die störende Linie L selbst als Referenz. Dann sind $x_3 = t_1/t_2$ und $u(x_3) = 0$ für X_3 anzusetzen, wobei t_1 und t_2 die Messdauern der Spektren sind. Im zweiten Fall dient eine andere Linie L' des störenden Nuklids im zu untersuchenden Spektrum als Referenz. Dann müssen die Nettointensitäten i und i' der Linien L bzw. L' und die zugehörigen Standardunsicherheiten $u(i)$ und $u(i')$ aus dem gesondert gemessenen Spektrum ermittelt werden, und es sind anzusetzen

$$x_3 = \frac{i}{i'}; \quad u^2(x_3) = x_3^2 \cdot \left(\frac{u^2(i)}{i^2} + \frac{u^2(i')}{i'^2} \right) \quad (\text{C.19})$$

C.5 Entfaltung von Spektren

C.5.1 Besondere Größen und Formelzeichen in C.5

i	Kanalnummer in einem Vielkanalspektrum aus einer spektrometrischen Kernstrahlungsmessung, ($i = 1, \dots, m$)
$\mathcal{G}$	stetiger Parameter (z. B. Energie oder Zeit), der die verschiedenen Kanäle in einem Vielkanalspektrum charakterisiert
$\mathcal{G}_i$	mit Kanal i , ($i = 1, \dots, m$) verbundener Wert von $\mathcal{G}$
t	Messdauer
m	Anzahl der Kanäle in einem Vielkanalspektrum
N_i	Poisson-verteilte Zufallsvariable der während der Messdauer t gezählten Impulse im Kanal i , ($i = 1, \dots, m$)
n_i	Anzahl der während der Messdauer t gezählten Impulse im Kanal i , ($i = 1, \dots, m$), Schätzwert von N_i
X_i	auszugleichende Eingangsgröße der Auswertung, Zufallsvariable der Zählrate der während der Messdauer t gezählten Impulse im Kanal i , $X_i = N_i/t$, ($i = 1, \dots, m$)
X	Spaltenmatrix der X_i
x_i	Zählrate der während der Messdauer t gezählten Impulse im Kanal i , $x_i = n_i/t$, ($i = 1, \dots, m$); Schätzwert für X_i
x	Spaltenmatrix der x_i
$u(x_i, x_j)$	Kovarianz in Verbindung mit x_i und x_j
Y_k	Ergebnisgröße (Parameter) aus der Entfaltung eines Vielkanalspektrums; ($k = 1, \dots, n$)
Y	Spaltenmatrix der Y_k
y	Spaltenmatrix der y_k
y_k	Schätzwert der Ergebnisgröße Y_k ($k = 1, \dots, n$)
$u(y_k)$	Standardunsicherheit zu y_k
$\tilde{y}$	Spaltenmatrix y nach Ersetzung von y_k durch $\tilde{y}$
z	Spaltenmatrix der Werte z_i , ausgeglichene Werte für x_i
$H(\mathcal{G}_i)$	funktionale Beziehung zur Darstellung der spektralen Dichte mit den Stützstellen $\mathcal{G}_i$ eines Vielkanalspektrums
$\Psi_k(\mathcal{G})$	Funktion zur Beschreibung der Form einer bestimmten spektralen Linie oder des Untergrundes, ($k = 1, \dots, n$)
n	Anzahl der Ergebnisgrößen
p_i	Schätzwert für eine nicht auszugleichende Eingangsgröße
p	Spaltenmatrix der p_i
w	Spaltenmatrix der Schätzwerte der Eingangsgrößen; $w = (x_1, \dots, x_m, p_1, p_2, \dots)^T$ (transponierte Zeilenmatrix)
A	Ansprechmatrix eines Spektrometers
A_{ik}	Elemente der Ansprechmatrix A
U_x	Unsicherheitsmatrix von X
U_y	Unsicherheitsmatrix von Y
G_k	Funktion der Eingangsgrößen X_i , ($i = 1, \dots, m$) zur Darstellung der Ergebnisgröße Y_k
G	Spaltenmatrix der Funktion G_k
diag	Operator zur Bildung einer Diagonalmatrix

C.5.2 Modell der Entfaltung und allgemeine Behandlung von Unsicherheiten

Für die Entfaltung von spektroskopischen Messungen muss das Modell der Auswertung allgemeiner formuliert werden als in 5.2.1, um mehr als eine einzelne Messgröße und korrelierte Größen aufnehmen zu können. In diesem Fall wird das Modell durch ein System von n funktionalen Beziehungen beschrieben:

$$Y_k = G_k(X_1, \dots, X_m); \quad (k = 1, \dots, n) \quad (\text{C.20})$$

Die Schätzwerte y_k für die n Messgrößen Y_k werden aus Gleichung (C.20) gewonnen, indem Schätzwerte x_i für die m Eingangsgrößen X_i ($i = 1, \dots, m$) eingesetzt werden:

$$y_k = G_k(x_1, \dots, x_m); \quad (k = 1, \dots, n) \quad (\text{C.21})$$

Für die Standardunsicherheiten $u(x_i)$ und Kovarianzen $u(x_i, x_j)$, die mit den x_i verbunden sind, gelten folgende Beziehungen: $u(x_i, x_i) = u^2(x_i)$ und $u(x_i, x_j) = u(x_j, x_i)$ ($i \neq j$). Wenn diese bekannt sind, können analog die Standardunsicherheiten $u(y_k)$ und Kovarianzen $u(y_k, y_l)$, die mit y_k verbunden sind, wie folgt berechnet werden:

$$u(y_k, y_l) = \sum_{i,j=1}^m \frac{\partial G_k}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial G_l}{\partial x_j} \cdot u(x_i, x_j), \quad (k, l = 1, \dots, n) \quad (\text{C.22})$$

Man erhält $u(y_k) = \sqrt{u(y_k, y_k)}$ und $u(y_k, y_l) = u(y_l, y_k)$ ($k \neq l$). Zur Vereinfachung werden die partiellen Ableitungen $\partial G_k / \partial x_i$ für alle Eingangsgrößen X_i substituiert durch deren Schätzwerte x_i und verkürzt als $\partial G_k / \partial x_i$ in Gleichung (C.22) und im Folgenden dargestellt.

Die Modell-Funktionen G_k brauchen nicht unbedingt explizit als mathematische Ausdrücke vorzuliegen, sie dürfen auch als Algorithmus, z. B. in Form eines Rechenprogramms für die Auswertung, gegeben sein. In solchen Fällen oder wenn kompliziertere Modell-Funktionen beteiligt sind, können die partiellen Ableitungen möglicherweise nicht explizit angegeben werden. Die Differenzenquotienten können genügend genau numerisch bestimmt werden, indem die Hälfte der Standardunsicherheit $u(x_i)$ benutzt wird, um x_i zu variieren:

$$\frac{\partial G_k}{\partial x_i} = \frac{1}{u(x_i)} \cdot \left\{ G_k \left[x_1, \dots, x_i + \frac{1}{2} u(x_i), \dots, x_m \right] - G_k \left[x_1, \dots, x_i - \frac{1}{2} u(x_i), \dots, x_m \right] \right\} \quad (\text{C.23})$$

ANMERKUNG Die Gleichungen (C.21) bis (C.23) gelten für Modell-Funktionen G_k , die im Unsicherheitsbereich zwischen $x_i - u(x_i)$ und $x_i + u(x_i)$ ausreichend linear sind. Andernfalls müssen aufwändigere Prozeduren angewendet werden, wie sie in ISO/IEC GUIDE 98-3, 5.1.2 Anmerkung und [1], Appendix C, [2], Appendix E, [6], [7] und [16] beschrieben sind.

Bei der Darstellung einer Entfaltung wird die Matrix-Schreibweise benutzt. Dabei werden diejenigen Größen, Werte und Funktionen, die mit demselben Buchstaben bezeichnet sind, jeweils zu einer Spaltenmatrix zusammengefasst und diese mit demselben, aber fett gesetzten Buchstaben bezeichnet. Spaltenmatrizen werden als transponierte Zeilenmatrizen geschrieben. Beispiele sind $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots)^T$ und $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots)^T$ und $\mathbf{G}(\mathbf{x}) = (G_1, G_2, \dots)^T$. Zusätzlich werden die Unsicherheitsmatrizen $\mathbf{U}_x = [u(x_i, x_j)]$ und $\mathbf{U}_y = [u(y_k, y_l)]$ und auch die Ansprechmatrix $\mathbf{G}_x = (\partial G_k / \partial x_i)$ eingeführt. Gleichungen (C.21) und (C.22) lassen sich damit verkürzen zu

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}(\mathbf{x}); \quad \mathbf{U}_y = \mathbf{G}_x \mathbf{U}_x \mathbf{G}_x^T \quad (\text{C.24})$$

C.5.3 Entfaltung des Spektrums bei spektrometrischen Kernstrahlungsmessungen

Die Auswertung einer spektrometrischen Kernstrahlungsmessung ist die (im Allgemeinen nichtlineare) Entfaltung eines gemessenen Vielkanalspektrums. Sie kann auch die Entfaltung mehrerer anderer gemessener Spektren und die Berücksichtigung von Daten aus anderen Experimenten oder Quellen umfassen. Die gesamte Auswertung wird Entfaltung eines Spektrums genannt.

Die Eingangsgrößen X_i einer Entfaltung eines Spektrums sind alle mit Unsicherheiten behaftete Größen, von denen gemessene oder andere Daten bei der Entfaltung benutzt werden. Dazu gehören alle Größen X_i , für die gemessene oder geschätzte Werte x_i vorliegen und die der Ausgleichsrechnung unterliegen sollen. Eine derartige Eingangsgröße X_i ist jedem Kanal i des Vielkanalspektrums zuzuordnen. Während der Messdauer t wird im Kanal i die Anzahl der Ereignisse n_i gezählt. Außerdem muss jedem Parameter, für den ein gemessener Wert oder ein Schätzwert vor der Auswertung gegeben ist, eine Eingangsgröße X_i zugeordnet werden, wenn er der Ausgleichsrechnung unterliegen soll. Solche Parameter können z. B. die Halbwertsbreiten von Linien oder Parameter der Ansprechmatrix des Spektrometers sein.

Für eine Zählrate $X_i = \rho_i$ mit dem gegebenen Zählergebnis n_i , das während der Messdauer t registriert wurde, und wenn die Zählung in den einzelnen Kanälen als unabhängig und Poisson verteilt angenommen werden kann, gelten die Beziehungen wie in 5.2.1: $x_i = r_i = n_i/t$ und $u^2(x_i) = n_i/t^2$ (siehe auch F.1, insbesondere, wenn $n_i = 0$). Zusätzlich können die Kovarianzen null gesetzt werden, d. h. $u(x_i, x_j) = 0$ ($i \neq j$). Die Messdauern für die einzelnen Kanäle müssen nicht notwendigerweise gleich sein. Zu den Komponenten der Unsicherheit der Messung gehören die Unsicherheitsmatrizen $U_x = [u(x_i, x_j)]$ und $U_y = [u(y_k, y_l)]$. Die Matrix U_x ist diagonal mit den Diagonalelementen $u^2(x_i) = n_i/t^2$, d. h. $U_x = \text{diag}(x_i/t)$.

Daneben gibt es Eingangsgrößen, für die Schätzwerte p_i vorliegen, die aber nicht ausgeglichen werden sollen. Solche sind z. B. Stützstellen, Kalibrierparameter, Korrekturen oder Einflussgrößen, die schon oben erwähnt wurden. Auch die mit Kanal i verbundenen Werte g_i des Parameters g , der zu unterschiedlichen Kanälen des Vielkanalspektrums in Beziehung steht, sind solche Größen.

Im Prinzip sollten alle Größen, für die Schätzwerte vorliegen, ausgeglichen werden. In vielen Fällen ist dies jedoch nur schwer durchführbar oder die Werte solcher Größen sind aus anderen Experimenten gewonnen, so dass es nicht sinnvoll ist, auch diese auszugleichen. Außerdem gibt es Größen, die hinreichend gut bekannt sind, so dass ihre Unsicherheiten vernachlässigbar sind. Solche Größen werden nicht als Eingangsgrößen, sondern als Konstanten betrachtet. Im einfachen Fall der Auswertung eines einzigen Spektrums, bei der nur die Unsicherheit der Poisson-verteilten Anzahl der Ereignisse berücksichtigt werden sollen, werden nur diese Anzahlen als Eingangsgrößen behandelt. Alle anderen Größen werden dann als Konstanten betrachtet.

Die Messgröße, für die die charakteristischen Grenzen festzulegen sind, ist eine der Ergebnisgrößen Y_k , die durch die Entfaltung eines Spektrums ermittelt werden sollen. Ergebnisgrößen können auch folgende Parameter sein: die Nettofläche einer Spektrallinie, die Anzahl der Untergrundereignisse unter einer Spektrallinie oder in einem bestimmten Kanal, ein unbekannter Parameter der Ansprechmatrix. Das Modell ist so auszulegen, dass die Anzahl der zu ermittelnden Ergebnisgrößen möglichst klein ist.

Zur Vereinfachung werden die Schätzwerte x und p als kombinierte Spaltenmatrix $w = (x_1, \dots, x_m, p_1, p_2, \dots)^T$ zusammengefasst.

Für die Entfaltung werden die Schätzwerte x und p der Eingangsgrößen und die ihnen zugeordnete Unsicherheitsmatrix $U_w(x, p)$ benötigt. Diese Unsicherheitsmatrix muss als Kovarianzmatrix nach ISO/IEC GUIDE 98-3 (siehe auch Literaturhinweise [1], [2]) berechnet werden. Die Unsicherheitsmatrix $U_w(x, p)$ wird als Funktion von x benötigt, da x zur Berechnung der charakteristischen Grenzen unterschiedliche Werte annehmen muss, während p konstant bleibt. Die Unsicherheitsmatrizen U_x und U_p , die x und p zugeordnet sind, sind Teilmatrizen von U_w . Der Rang von U_x darf nicht kleiner sein als die Anzahl n der Modellgleichungen. Wenn die Werte für x und p aus unterschiedlichen, voneinander unabhängigen Experimenten stammen, besteht keine Korrelation zwischen x und p . Dann sind diejenigen Elemente der Unsicherheitsmatrix U_w null, die Paaren x_i und p_k zugeordnet sind.

Genauere Beschreibungen für das Entfalten von Spektren bei spektrometrischen Kernstrahlungsmessungen sind an anderer Stelle zu finden [17], [31], [32].

Das Modell der Entfaltung besteht aus den n Beziehungen zwischen den Eingangs- und Ergebnisgrößen, die formal und sehr allgemein als eine Spaltenmatrix $H(y, p)$ der Modellfunktionen H_k geschrieben werden, die alle von diesen Größen abhängen:

$$x = H(y, p) \quad (\text{C.25})$$

Wenn eine Ergebnisgröße Y_i gleichzeitig eine Eingangsgröße X_i ist, für die ein Schätzwert x_i vorliegt, ist die Gleichung $y_i = x_i$ den Modellgleichungen hinzuzufügen. Wenn eine Ergebnisgröße, wie z. B. eine Aktivität, eine Teilchenfluenz oder eine Äquivalentdosis, von anderen Ergebnisgrößen abhängt, muss diese funktionale Abhängigkeit ebenfalls den Modellgleichungen hinzugefügt werden. Die Modellgleichungen müssen nicht unbedingt explizit als mathematische Ausdrücke vorzuliegen, sie dürfen auch als Algorithmus, z. B. in Form eines Rechenprogramms für die Auswertung gegeben sein.

Bei der Entfaltung eines gemessenen Vielkanalspektrums werden nach Gleichung (C.25) Funktionen $H(Y)$ an die Schätzwerte x der m Eingangsgrößen X angepasst, z. B. an die sich aus den Kanalinhalt n_i ergebenden Messwerte $x_i = n_i/t$ der spektralen Dichte.

Die Berechnung der Schätzwerte y der Ergebnisgrößen Y , der Unsicherheitsmatrix U_y , die y zugeordnet ist, und der angepassten Werte z der Eingangsgrößen X mit den gegebenen, gemessenen oder geschätzten Daten aller Eingangsgrößen w mit der zugeordneten Unsicherheitsmatrix U_w ist im Allgemeinen eine nichtlineare Ausgleichsrechnung. Lösungen werden in C.5.4. beschrieben.

Bei einer in den Parametern Y linearen Entfaltung wird die spektrale Dichte $H(\mathcal{G}_i)$ durch die Spaltenmatrix $X = (H(\mathcal{G}_i))$ dargestellt. Die $\mathcal{G}_i$ sind die als exakt angenommenen Stützstellen, z. B. die den Kanälen zugeordneten Energien oder Zeiten. Die spektrale Dichte wird mittels eines Funktionensystems $\Psi_k(\mathcal{G}_i)$ approximiert:

$$X_i = H(\mathcal{G}_i) = \sum_{k=1}^n \Psi_k(\mathcal{G}_i) \cdot Y_k; \quad (i = 1, \dots, m) \quad \text{oder} \quad X = AY \quad (\text{C.26})$$

Die konstante Ansprechmatrix A besitzt die Elemente $A_{ik} = \Psi_k(\mathcal{G}_i)$. Die Funktionen $\Psi_k(\mathcal{G}_i)$ beschreiben die Form der einzelnen Spektrallinien oder den Verlauf von Beiträgen zum Untergrund. (Beispiele für $\Psi_k(\mathcal{G}_i)$ bei der Auswertung von Alpha- und Gamma-Spektren siehe C.5.5 und C.5.6.) Die zu ermittelnden Ergebnisgrößen Y_k sind z. B. die Nettoflächen der Spektrallinien.

C.5.4 Verfahren zur Entfaltung des Spektrums

Die Entfaltung des Spektrums besteht im Wesentlichen darin, neue Werte z der Eingangsgrößen X an die gegebenen Schätzwerte x anzupassen, wobei $z = H(y, p)$ von den Schätzwerten y der Messgröße, die zu bestimmen ist, und von festen gegebenen Daten p abhängen, die nicht ausgeglichen werden sollen. Als Verfahren zur Entfaltung des Spektrums empfiehlt sich besonders eine im Allgemeinen nichtlineare Ausgleichsrechnung, weil sie leicht mit der Behandlung der Unsicherheiten kombiniert werden kann und die folgende kompakte und transparente Darstellung erlaubt.

Die Schätzwerte y der Messgröße werden mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate so ermittelt, dass

$$\chi^2 = (x - z)^T U_x^{-1} (x - z) = \min \quad (\text{C.27})$$

unter der Nebenbedingung $z = H(y, p)$. Daraus und mit der Unsicherheitsmatrix $U_x(x)$ als Funktion von x werden die charakteristischen Grenzen bestimmt. Das Ergebnis der Minimierungsaufgabe sind die Funktionen

$$y = G(x, p) = G(w) \quad (\text{C.28})$$

$$z = H(y, p) = H[G(w), p] = F(w) \quad (\text{C.29})$$

und die Unsicherheitsmatrizen

$$U_y = G_w U_w G_w^T; \quad U_z = F_w U_w F_w^T \quad (\text{C.30})$$

entsprechend Gleichung (C.24), wobei w anstelle von x steht. Die Spaltenmatrix w kombiniert x und p . Die Unsicherheitsmatrix U_w kombiniert entsprechend die Unsicherheitsmatrizen U_x und U_p . Die Ansprechmatrizen F_w und G_w bezeichnen die Matrizen der partiellen Ableitungen der Funktionen $F(w)$ bzw. $G(w)$. Alle Matrizen der rechten Seite von Gleichung (C.30) sind Funktionen von w .

Die Ergebnisse der Anpassung sind verträglich mit den gegebenen Daten x , wenn das standardisierte Chi-Quadrat χ_s^2 zu $m > n$ passt und mit dem gefundenen Minimum $\chi_{\min}^2$ die Chi-Quadrat-Bedingung

$$\chi_s^2 = \frac{|\chi_{\min}^2 - (m - n)|}{\sqrt{2(m - n)}} \leq k_{1-\delta/2} \quad (\text{C.31})$$

erfüllt. Als Irrtumswahrscheinlichkeit wird $\delta = 0,05$ empfohlen.

Zur Berechnung der charakteristischen Grenzen wird die Funktion $\tilde{u}(\tilde{y})$ benötigt. $\tilde{u}(\tilde{y})$ ist die Standardunsicherheit der Erkennungsgröße Y zu dem aus der Entfaltung gewonnenen Messergebnis y , aufgefasst als Funktion des wahren Wertes $\tilde{y}$ der Messgröße Y . $\tilde{u}(\tilde{y})$ wird wie folgt berechnet: Es sei z. B. Y_1 die Erkennungsgröße Y . Um $\tilde{u}(\tilde{y})$ zu berechnen, wird der Schätzwert y_1 durch $\tilde{y}$ ersetzt, was $\tilde{y} = (\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \dots, \tilde{y}_n)^T$ ergibt und jetzt anstelle von y benutzt wird. Das führt zu $\tilde{z} = H(\tilde{y}, p)$ und zu der Spaltenmatrix $\tilde{w}$ als Kombination von $\tilde{z}$ und p . Weiterhin folgt $\tilde{U}_w$ aus der Kombination von $U_x(\tilde{z})$ und U_p . Die Matrizen $\tilde{w}$ und $\tilde{U}_w$ werden in Gleichung (C.30) anstelle von w und U_w benutzt, um $\tilde{U}_y$ zu berechnen. Die Quadratwurzel aus dem (1,1)-Element dieser Unsicherheitsmatrix führt schließlich auf die benötigte Funktion $\tilde{u}(\tilde{y})$.

In vielen Fällen ist die Funktion $H(y, p)$, die an gegebene Schätzwerte x anzupassen ist, linear in y , d. h. $z = H(y, p) = Ay$, wobei die Matrix A nicht von p abhängig ist und die Ansprechmatrix des Spektrometers darstellt. Dann sind x und w identisch, und die Minimierungsprozedur mit der Methode der kleinsten Quadrate kann leicht ausgeführt werden und liefert

$$y = U_y A^T U_x^{-1}(x) x; \quad U_y = [A^T U_x^{-1}(x) A]^{-1} \quad (\text{C.32})$$

$$z = Ay; \quad U_z = A U_y A^T \quad (\text{C.33})$$

$$\chi_{\min}^2 = x^T U_x^{-1}(x) (x - z); \quad \tilde{U}_y = [A^T U_x^{-1}(A \tilde{y}) A]^{-1} \quad (\text{C.34})$$

C.5.5 Entfaltung von Alpha-Spektren

In vielen Fällen der Alpha-Spektrometrie, wenn ein Alpha-Spektrum mit einem Halbleiterdetektor oder einer Gitter-Ionisationskammer gemessen wird, kann das Spektrum als Überlagerung einzelner Spektrallinien ohne Untergrundbeiträge beschrieben werden. In diesem Fall genügt ein lineares Modell der Art $x = A(p)y$. Dann kann die Form der Spektrallinie durch folgenden Ansatz beschrieben werden [33] bis [37]:

$$L_j(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{R_j(E')}{\sqrt{2\pi\sigma_j^2}} \exp\left(-\frac{(E' - E)^2}{2\sigma_j^2}\right) dE'$$

$$R_j(E) = \alpha_{0,j} \cdot \delta(E - E_{0,j}) + \sum_{k=1}^3 (\alpha_{k,j}/\tau_{k,j}) \cdot \exp[(E - E_{0,j})/\tau_{k,j}] \quad \text{für } (E \leq E_{0,j}) \quad (\text{C.35})$$

$$R_j(E) = 0 \quad \text{für } (E > E_{0,j})$$

$$\alpha_{0,j} + \alpha_{1,j} + \alpha_{2,j} + \alpha_{3,j} = 1$$

E ist die Energie der Alpha-Teilchen. Alle anderen Größen sind gegebene Parameter der Spektrallinie. Diese Parameter sowie die Parameter der Energie-Kalibrierung, die Kanalnummer i und die Energie E sind Schätzwerte der Eingangsgrößen p oder Größen, die als bekannte Konstanten angenommen werden. Die Elemente der Ansprechmatrix A sind dann $A_{ij} = L_j(E_i)$ mit der Energie E_i , die dem Kanal i zugeordnet ist.

Die Spektrallinie zur Alpha-Energie $E_{0,j}$ ist physikalisch durch den ersten Term von $R_j(E)$, die Delta-Funktion, in Gleichung (C.35) beschrieben. Die drei folgenden Terme beschreiben den Energieverlust, den das Alpha-Teilchen auf seinem Weg zum Nachweis erleidet. Das Faltungsintegral in Gleichung (C.35) berücksichtigt die Auflösung σ des Spektrometers, die von der Energie E abhängt.

Die zu ermittelnden Parameter y_j sind die Linienflächen. Sie bilden die Spaltenmatrix y der Ergebnisgrößen. Eine von ihnen ist die zu betrachtende Größe Y . Für das Spektrum erhält man den Modellansatz $x_i = \sum_j L_j(E_i) \cdot y_j$ oder in Matrixschreibweise $x = A(p)y$.

Wenn einige der Parameter p nicht bekannt sind, z. B. die Lage der Spektrallinie oder Parameter der Linienform, aber ebenfalls durch die Entfaltung ermittelt werden sollen, müssen diese unbekannten Größen zu den Ergebnisgrößen y hinzugefügt werden. Dann hängt A auch von den Schätzwerten y ab und es liegt der Fall eines nichtlinearen Modells nach Gleichung (C.25) mit $x = H(y, p) = A(y, p)y$ vor.

Die Funktionen $L_j(E)$ sind die Ansprechfunktionen des Spektrometers. Das kann z. B. ein Halbleiterdetektor oder eine Gitter-Ionisationskammer in der Alpha-Spektroskopie sein oder auch ein Halbleiterdetektor in der Gamma-Spektroskopie oder eine Bonner-Kugel in der Neutronen-Spektroskopie. Mathematisch können diese Funktionen nahezu beliebig gewählt werden und können daher angesetzt werden, wie es aus phänomenologischen oder physikalischen Gründen notwendig ist. Sie können auch gemessene oder berechnete Funktionen sein, die die beschriebenen physikalischen Prozesse widerspiegeln. Sie können durch analytische Ausdrücke oder lediglich numerisch gegeben sein. Mit diesen Ansprechfunktionen kann man nicht nur die Formen von Spektrallinien beschreiben, auch der Untergrund unter Spektrallinien kann durch beliebige Überlagerung derartiger Funktionen modelliert werden. Dies wird in C.5.6 am Beispiel der Gamma-Spektrometrie beschrieben.

C.5.6 Entfaltung von Gamma-Spektren

In der Gamma-Spektrometrie ist der Untergrund unter einer Spektrallinie grundsätzlich nicht vernachlässigbar. Dennoch kann ein lineares Modell der Art $x = A(p)y$ zur Entfaltung benutzt werden gemäß der allgemeinen Prozedur wie in C.1. Der folgende Ansatz kann angewendet werden, um die Überlagerung der Beiträge einer Spektrallinie und des Untergrunds in einem betrachteten Spektrumsabschnitt zu beschreiben:

$$\begin{aligned} L_1(E) &= \exp\left[-(E - E_0)^2 / (2\sigma^2)\right] / \sqrt{2\pi\sigma^2} \\ L_2(E) &= \arctan\left[-(E - E_0)/a\right] \\ L_j(E) &= (E - E_0)^{j-3}; \quad (j = 3, 4, 5, 6) \end{aligned} \quad (\text{C.36})$$

Die erste Funktion in Gleichung (C.36) beschreibt die Form einer Spektrallinie als Gauß-Kurve mit der Auflösung σ des Spektrometers. In der Praxis kann es notwendig sein, kompliziertere Linienformen anzusetzen, die z. B. einen niederenergetischen exponentiellen Abfall beinhalten, was die Zahl der Linienform-Parameter erhöht. Die zweite Zeile in Gleichung (C.36) stellt eine Stufenfunktion unter der Spektrallinie dar, die als Folge unvollständiger Ladungssammlung erwartet werden muss. Der Parameter a , der die Steilheit dieser Stufenfunktion charakterisiert, muss vorab bekannt sein. Die übrigen Funktionen in Gleichung (C.36) dienen dazu, den Untergrund phänomenologisch durch ein Polynom dritten Grades zu modellieren. Statt der Energie E können auch die Kanalnummern i benutzt werden, um Gleichung (C.36) aufzustellen.

E bezeichnet die im Detektor deponierte Energie. Alle anderen Größen sind Parameter der Spektrallinie oder der Stufenfunktion des Untergrunds. Diese Parameter σ und a aller Spektrallinien sowie die der Energiekalibrierung, die dem Kanal i die Energie E_i zuordnet, sind Eingangsgrößen p oder werden als bekannte Konstanten angenommen. Die Elemente der Ansprechmatrix A sind dann $A_{ij} = L_j(E_i)$ mit der Energie E_i , die dem Kanal i zugeordnet ist.

Die zu ermittelnden Parameter y_j sind die Linienflächen und die jeweiligen Untergrundbeiträge. Sie bilden die Spaltenmatrix y der Ergebnisgrößen. Eine der Linienflächen ist die zu betrachtende Größe Y . Für das Spektrum erhält man den Modellansatz $x_i = \sum_j L_j(E_i) \cdot y_j$ oder in Matrixschreibweise $x = A(p)y$.

Im Gegensatz zur Alpha-Spektrometrie sind in der Gamma-Spektrometrie häufig einige der Parameter p nicht genau bekannt, so z. B. die Lage einer Spektrallinie oder Parameter der Linienform oder des Untergrundes. Sie werden ebenfalls ausgehend von Schätzwerten durch die Entfaltung ermittelt, und für sie müssen daher entsprechende Ergebnisgrößen zu der Spaltenmatrix y hinzugefügt werden. Dann hängt A auch von den Schätzwerten y ab, und es liegt der in der komplexen Gamma-Spektrometrie häufig vorkommende Fall eines nichtlinearen Modells nach Gleichung (C.25) mit $x = H(y, p) = A(y, p)y$ vor.

Ein numerisches Beispiel für die Entfaltung eines Gamma-Spektrums wird in D.5.3 behandelt.

Nur für die Normungsarbeit

Anhang D (informativ)

Anwendungsbeispiele

D.1 Allgemeines

Dieser Anhang D enthält numerische Beispiele zu den in den normativen Anhängen B und C behandelten Anwendungen. Auf die bei den Berechnungen benutzten Gleichungen wird jeweils verwiesen. In allen Beispielen wurden zuerst y , $u(y)$ und $\tilde{u}(\tilde{y})$ ermittelt und danach die charakteristischen Grenzen sowie der beste Schätzwert der Messgröße mit der zugehörigen Standardunsicherheit nach den in Abschnitt 6 oder A.5 bis A.8 angegebenen Gleichungen sowie unter Anwendung von Anhang E berechnet.

Die Daten in den Tabellen D.1 bis D.4 sind oft mit mehr Stellen als sinnvoll angegeben, damit die Rechnungen auch mit höherer Genauigkeit nachvollzogen und verifiziert werden können, insbesondere bei der Entwicklung von Rechenprogrammen. Auch einige komplizierter zu berechnende Zwischenwerte sind für Kontrollzwecke angegeben.

Die Darstellung der Beispiele in dieser Norm ist nicht mit der Absicht verbunden, Messverfahren für die jeweiligen Anwendungen zu standardisieren. Die Beispiele dienen zur Erklärung für die in dieser Norm beschriebenen Anwendungen.

D.2 Beispiel 1: Messung der Alpha-Aktivitätskonzentration

D.2.1 Zählende Messung

Bei dieser Art des Beispiels handelt es sich um die Untersuchung der Alpha-Aktivität in flüssigem Material durch direkte Deposition auf einer Abscheideplatte (Planchet) und nachfolgender zählender Messung der Alpha-Partikel. Die Messgröße Y ist die volumenbezogene Alpha-Aktivität c_A (Aktivität geteilt durch Volumen der Probe). Dafür sollen die charakteristischen Grenzen, der beste Schätzwert und die zugehörige Standardunsicherheit berechnet werden. Das Modell der Auswertung lautet in diesem Fall nach Gleichung (4)

$$Y = c_A = \frac{X_1 - X_2}{X_5 X_7 X_9} = \frac{r_g - r_0}{V \cdot \varepsilon \cdot f} \quad (\text{D.1})$$

Dabei sind $X_1 = r_g$ und $X_2 = r_0$ die Zählraten des Bruttoeffektes bzw. Nulleffektes, $X_5 = V$ das Volumen, aus dem die Alpha-Aktivität abgeschieden wurde, $X_7 = \varepsilon$ die Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors und $X_9 = f$ der Selbstabsorptionsfaktor der Alpha-Partikel in dem abgeschiedenen Material.

Nach zählenden Messungen des Bruttoeffektes und des Nulleffektes mit den Messdauern t_g bzw. t_0 liegen die Anzahlen n_g bzw. n_0 der jeweils registrierten Ereignisse vor. Damit werden für die Zählraten X_1 und X_2 nach 5.2.2 die Schätzwerte $x_1 = r_g = n_g/t_g$ mit $u^2(x_1) = n_g/t_g^2 = r_g/t_g$ bzw. $x_2 = r_0 = n_0/t_0$ mit $u^2(x_2) = n_0/t_0^2 = r_0/t_0$ angesetzt. Die Messungen seien unter Zeitvorwahl erfolgt.

Die Nachweiswahrscheinlichkeit $\varepsilon = 0,3$ des Detektors wurde mit einem Kalibrierstrahler mit einer zertifizierten relativen Standardunsicherheit von 5 % ermittelt. Unter der Annahme, dass der statistische Anteil der Messunsicherheit der Messung an der Nachweiswahrscheinlichkeit vernachlässigbar ist, ergibt sich somit $u(\varepsilon) = 0,015$.

Aus früheren Messungen sei bekannt, dass der Selbstabsorptionsfaktor f der Alpha-Partikel in dem nicht näher bezeichneten Abscheidematerial zufällig zwischen 0,4 und 0,8 liegt. Daraus ergeben sich der mittlere Schätzwert $f = 0,6$ und unter Ansatz einer Rechteckverteilung über den Bereich der möglichen Werte von f mit der Breite $\Delta f = 0,40$ die zugehörige Standardunsicherheit $u(f) = \Delta f / \sqrt{12}$ (siehe 5.2.2, vorletzter Absatz). Der Selbstabsorptionsfaktor f hat eine hohe relative Standardunsicherheit $u(f)/f = 0,19$, und die

Messgröße hängt vom Kehrwert dieses Faktors ab. Darum ist ein nichtlinearer Einfluss zu erwarten (siehe C.5.2 Anmerkung).

Die relative Standardunsicherheit des Probenvolumens $V = 0,5 \text{ l}$ wird aus Erfahrung mit 1 % angesetzt, woraus $u(V) = 0,005 \text{ l}$ folgt.

Zu den Eingangsdaten, Vorgaben, einigen Zwischenwerten und Ergebnissen siehe Tabelle D.1. Die Ergebnisse wurden nach 5.2.2, 5.3.2 und Abschnitt 6 berechnet. Insbesondere wurden für y , $u(y)$ und $\tilde{u}(\tilde{y})$ die Gleichungen (6), (9) bzw. (14) verwendet. Dabei sind $x_3 = 1$ und $u(x_3) = 0$ sowie $x_4 = 0$ und $u(x_4) = 0$ zu setzen, weil X_3 und X_4 im Modell nicht vorkommen. Einige Standardunsicherheiten sind in Tabelle D.1 nicht angegeben, weil sie nicht explizit für die Gleichungen benötigt werden.

D.2.2 Messung mit Ratemeter

Die Messung der Zählrate kann auch mittels eines Ratemeters erfolgen (siehe B.3). Im Gegensatz zu D.2.1 gelten hier $u^2(x_1) = r_g / (2\tau_g)$ und $u^2(x_2) = r_0 / (2\tau_0)$. Für einen leichteren Vergleich sind die Eingangsdaten der Ratemeter-Messung in Tabelle D.1 fiktiv so gewählt, dass das primäre Messergebnis y gegenüber der zählenden Messung fast unverändert ist. Die Dämpfungszeitkonstanten beeinflussen die Erkennungsgrenze und die Nachweisgrenze stark. Sie sind mit $\tau_g = \tau_0 = 60 \text{ s}$ zu klein gewählt und machen dadurch das Messverfahren für den Messzweck ungeeignet, weil $y^\# > y_r$. Die Wahl $\tau_g = \tau_0 = 120 \text{ s}$ würde hier bereits Abhilfe schaffen.

Nur für die Normung

Tabelle D.1 – Eingangsdaten, Zwischenwerte und Ergebnisse zu Beispiel 1

Eingangsdaten und Vorgaben			
Größe	Formelzeichen	Wert	Standard-unsicherheit
Zählende Messung, Bruttoeffekt:			
Anzahl registrierter Ereignisse	n_g	2 591	Vernachlässigt
Messdauer	t_g	360 s	
Zählende Messung, Nulleffekt:			
Anzahl registrierter Ereignisse	n_0	41 782	Vernachlässigt
Messdauer	t_0	7 200 s	
Ratemeter-Messung, Bruttoeffekt			
Zählrate	r_g	$7,2 \text{ s}^{-1}$	Nicht benötigt
Dämpfungszeitkonstante	τ_g	60 s	
Ratemeter-Messung, Nulleffekt:			
Zählrate	r_0	$5,8 \text{ s}^{-1}$	Nicht benötigt
Dämpfungszeitkonstante	τ_0	60 s	
Probenvolumen	V mit $u(V)$	0,5 l	0,005 l
Nachweiswahrscheinlichkeit	ε mit $u(\varepsilon)$	0,3	0,015
Selbstabsorptionsfaktor	f mit $u(f)$	0,6	$0,4/\sqrt{12}$
Wahrscheinlichkeiten	α, β, γ	0,05	–
Richtwert	y_r	10 Bq l^{-1}	–
Zwischenwerte			
Größe und Berechnung		Wert ^a	Wert ^b
$w = 1/(V \varepsilon f)$ nach Gleichung (7)		$11,11 \text{ l}^{-1}$	
$u_{\text{rel}}^2(w) = u^2(V)/V^2 + u^2(\varepsilon)/\varepsilon^2 + u^2(f)/f^2$ nach Gleichung (10)		0,039 6	
$\omega = \Phi(y/u(y))$ nach Gleichung (E.1)		0,999 9	0,999 4
$p = \omega \cdot (1 - \gamma/2)$		0,975 0	0,974 4
$q = 1 - \omega \gamma/2$		0,975 0	0,975 0
k_p nach Gleichung (E.2)		1,959 8	1,950 0
k_q nach Gleichung (E.2)		1,960 0	1,960 2
Ergebnisse			
Messgröße:	Y	c_A ^a	c_A ^b
Größe	Formelzeichen	Wert in Bq l^{-1}	
Primäres Messergebnis	y	15,490 7	15,555 6
Standardunsicherheit zu y	$u(y)$	3,475 5	4,792 3
Erkennungsgrenze	y^*	2,377 7	5,683 8
Messeffekt erkannt?	$y > y^* ?$	Ja	Ja
Nachweisgrenze	$y^\#$	5,420 2	13,013 7
Messverfahren für Messzweck geeignet?	$y^\# \leq y_r ?$	Ja	Nein
Untere Vertrauensgrenze	$y^\triangleleft$	8,679 1	6,209 3
Obere Vertrauensgrenze	$y^\triangleright$	22,302 6	24,949 3
Bester Schätzwert der Messgröße	$\hat{y}$	15,490 7	15,565 4
Standardunsicherheit zu $\hat{y}$	$u(\hat{y})$	3,475 5	4,776 2
^a Zählende Messung mit Zeitvorwahl			
^b Ratemeter-Messung			

D.3 Beispiel 2: Messung der spezifischen Aktivität eines betastrahlenden Radionuklids nach chemischer Abtrennung

D.3.1 Unbekannter Einfluss der Probenbehandlung

Eine Bodenkontamination mit einem Radionuklid kann durch chemische Abtrennung dieses Nuklids und anschließende Messung der Strahlung des Betazerfalls untersucht werden. Messgröße Y ist die spezifische Aktivität A_M (Aktivität geteilt durch die Masse der Probe, siehe ISO 31-9, wofür die charakteristischen Grenzen, der beste Schätzwert und die zugehörige Standardunsicherheit berechnet werden sollen. Die Messung ist aufgrund der Probenbehandlung durch die chemische Abtrennung zufallsbedingt beeinflusst. Deshalb ist nach B.4 vorzugehen. Um den Einfluss zu erfassen und zu vermindern, werden mehrere gleichartige Bodenproben, Blindproben und nötigenfalls auch Referenzproben gesondert untersucht und die einzelnen Ergebnisse anschließend jeweils gemittelt und hinsichtlich der Messunsicherheit analysiert.

Das Modell der Auswertung lautet in diesem Fall nach Gleichung (4)

$$Y = A_M = \frac{X_1 - X_2}{X_5 X_7 X_9} = \frac{\bar{\rho}_g - \bar{\rho}_0}{M \kappa \varepsilon} \quad (\text{D.2})$$

Dabei sind $X_1 = \bar{\rho}_g$ und $X_2 = \bar{\rho}_0$ die mittleren Zählraten der einzelnen zu untersuchenden Proben bei der Messung des Bruttoeffektes bzw. der Blindproben bei der Messung des Nulleffektes. $X_5 = M$ ist die identisch angesetzte Masse für alle Proben, Blindproben und Referenzproben, $X_7 = \kappa$ ist die Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors bei der zählenden Messung der Betastrahlung in der aktuellen Messgeometrie und $X_9 = \varepsilon$ ist der Ausbeutefaktor der chemischen Abtrennung des betrachteten Radionuklids. Gleichung (D.2) unterscheidet sich formal zwar nicht von Gleichung (D.1), jedoch durch andere Interpretationen der Größen X_i und ganz wesentlich darin, ob Zählraten oder Mittelwerte aus Zählraten angesetzt werden.

Nach zählenden Messungen des Bruttoeffektes an m_g zu untersuchenden Proben und des Nulleffektes an m_0 Blindproben unter Vorwahl der Messdauern t_g bzw. t_0 liegen die nach Gleichung (B.7) jeweils gemittelten Anzahlen $\bar{n}_g$ bzw. $\bar{n}_0$ der registrierten Ereignisse vor. Daraus folgen für die mittleren Zählraten X_1 und X_2 nach Gleichung (B.8) zunächst die Schätzwerte $x_1 = \bar{n}_g/t_g$ bzw. $x_2 = \bar{n}_0/t_0$. Weiterhin sind nach Gleichung (B.7) die empirischen Varianzen s_g^2 bzw. s_0^2 der einzelnen Zählergebnisse zu bilden, was nach Gleichung (B.9) die zu den Schätzwerten der Zählraten gehörenden Quadrate der Standardunsicherheiten $u^2(x_1) = s_g^2/(m_g t_g^2)$ bzw. $u^2(x_2) = s_0^2/(m_0 t_0^2)$ erbringt. Mit diesen sind dann für die Messgröße $Y = A_M$ der Schätzwert y und die zugehörige Standardunsicherheit $u(y)$ nach 5.2.2 und insbesondere nach den Gleichung (6) bzw. Gleichung (9) zu berechnen. Es sind $x_3 = 1$ mit $u(x_3) = 0$ und $x_4 = 0$ mit $u(x_4) = 0$ zu setzen, weil X_3 und X_4 im Modell nicht vorkommen. Anschließend können nach 6.4 und 6.5 die Vertrauensgrenzen, der beste Schätzwert $\hat{y}$ und die zugehörige Standardunsicherheit $u(\hat{y})$ berechnet werden, wegen $y \geq 4u(y)$ in diesem Beispiel als Näherungen nach den Gleichung (32) bzw. Gleichung (35).

Der nächste Schritt gilt der Funktion $\tilde{u}^2(\hat{y})$. Die Standardunsicherheit $u(x_1)$ liegt nicht als Funktion $h_1(x_1)$ vor. Jedoch kann die Interpolation nach Gleichung (19) verwendet werden. Dafür wird aber $\tilde{u}^2(0)$ benötigt und wie folgt gewonnen: In Gleichung (9) wird $y = \hat{y} = 0$ gesetzt, was zunächst $\tilde{u}^2(0) = w^2 \cdot (u^2(x_1) + u^2(x_2))$ ergibt. Weiterhin ist für $\hat{y} = 0$ nach 5.3.2 und B.4.2 der Quotient s_g^2/t_g^2 durch s_0^2/t_0^2 zu ersetzen. Das führt mit Gleichung (B.9) zu $u^2(x_1) = s_0^2/(m_g t_0^2)$ und schließlich zu

$$\tilde{u}^2(0) = w^2 \cdot (s_0^2/t_0^2) \cdot (1/m_g + 1/m_0) \quad (\text{D.3})$$

Die Erkennungsgrenze folgt dann aus Gleichung (21) und die Nachweisgrenze mit der Interpolation nach Gleichung (19) aus den Gleichung (22) oder Gleichung (26).

Zu den Eingangsdaten, Vorgaben, einigen Zwischenwerten und Ergebnissen siehe Tabelle D.2. (Die dort eingeklammerten Werte sowie die Ergebnisse in der letzten Spalte gehören zu D.3.2.) Der Richtwert ist einer Richtlinie zur Überwachung der Umweltradioaktivität entnommen.

D.3.2 Bekannter Einfluss der Probenbehandlung

Manchmal ist der zufällige Einfluss der Probenbehandlung aus früheren Messungen bereits bekannt, nämlich durch Messungen an Referenzproben oder an anderen Proben, die den aktuellen Proben ähnlich sind und zwar nicht eigens für Referenzzwecke, aber unter ähnlichen Bedingungen untersucht worden sind, so dass sie als Referenzproben angesehen werden können.

In diesem Fall kann auch nach den Gleichungen in B.4.3 vorgegangen werden. Zu den Daten der Beispielrechnung siehe ebenfalls Tabelle D.2. Um einen Vergleich mit D.3.1 zu ermöglichen, wurden dieselben Eingangsdaten wie dort verwendet, außerdem die Zählergebnisse der Referenzproben in Klammern. Im Unterschied zu D.3.1 ist hier nach Gleichung (B.15) die Varianz $u^2(x_1)$ als Funktion $h_1^2(x_1)$ von x_1 bekannt. Um $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ zu gewinnen, sind in Gleichung (B.16) erst y durch $\tilde{y}$ und dann $u^2(x_1)$ und $u^2(x_2)$ durch die Ausdrücke nach den Gleichung (B.15) bzw. Gleichung (B.14) zu ersetzen, so dass mit $x_1 = \tilde{y}/w + x_2$ und g^2 nach Gleichung (B.13)

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = w^2 \cdot \left[(x_1/t_g + g^2 x_1^2)/m_g + (x_2/t_0 + g^2 x_2^2)/m_0 \right] + \tilde{y}^2 u_{\text{rel}}^2(w) \quad (\text{D.4})$$

Die in Tabelle D.2 aufgeführten Ergebnisse zu D.3.1 und D.3.2 stimmen, wie es erwartet werden muss, im Wesentlichen überein. Für den Einflussparameter g ergibt sich der nach B.4.3 akzeptable Wert $0,1377 < 0,2$. Die Erkennungsgrenze und die Nachweisgrenze sind im Fall D.3.1 etwas kleiner als bei D.3.2, was auf die zusätzliche Information aus den Referenzproben zurückgeführt werden kann.

Nur für die Normung

Tabelle D.2 – Eingangsdaten, Zwischenwerte und Ergebnisse zu Beispiel 2

Eingangsdaten und Vorgaben				
Größe	Formelzeichen	Werte (in Klammern für D.3.2)		
Anzahl der Proben, Blindproben und Referenzproben	m_g, m_0, m_r	5, 5, (20)		
Anzahl registrierter Ereignisse:				
Proben (Bruttoeffekt)	$n_{g,i}$	1 832, 2 259, 2 138, 2 320, 1 649		
Blindproben (Nulleffekt)	$n_{0,i}$	966, 676, 911, 856, 676		
Referenzproben	$n_{r,i}$	(74 349, 67 939, 88 449, 83 321, 66 657, 64 094, 74 348, 93 576, 56 402, 66 785, 78 194, 69 221, 63 965, 70 503, 74 220, 97 422, 74 476, 71 784, 68 235, 74 989)		
				Standard- unsicherheit
Messdauern (generell)	t_g, t_0, t_r	30 000 s		Vernachlässigt
Probenmasse (generell)	M mit $u(M)$	0,100 kg		0,001 kg
Nachweiswahrscheinlichkeit	κ mit $u(\kappa)$	0,51		0,02
Ausbeutefaktor der chem. Abtrennung	ε mit $u(\varepsilon)$	0,57		0,04
Wahrscheinlichkeiten	α, β	0,05		–
Richtwert	y_r	0,5 Bq kg ⁻¹		–
Zwischenwerte				
Größe und Berechnung	Formelzeichen	Werte (in Klammern für D.3.2)		
Mittelwerte	$n_g, \bar{n}_0, \bar{n}_r$	2 039,6; 817,00; (73 946,5)		
und empirische Standardab- weichungen nach Gleichung (B.7)	s_g, s_0, s_r	288,14; 134,46; (10 185,0)		
Einflussparameter nach Gleichung (B.13)	$g = ((s_r^2 - \bar{n}_r) / \bar{n}_r^2)^{1/2}$	(0,137 7)		
Ergebnisse				
	Messgröße:	Y	A_M (D.3.1)	A_M (D.3.2)
Größe		Formelzeichen	Wert in Bq kg ⁻¹	
Primäres Messergebnis		y	1,401 9	1,401 9
Standardunsicherheit zu y		$u(y)$	0,198 7	0,194 2
Erkennungsgrenze		y^*	0,160 4	0,138 4
Messeffekt erkannt?		$y > y^* ?$	Ja	Ja
Nachweisgrenze		$y^\#$	0,378 6	0,305 3
Messverfahren für Messzweck geeignet?		$y^\# \leq y_r ?$	Ja	Ja
Untere Vertrauensgrenze		$y^\triangleleft$	1,012 4	1,021 3
Obere Vertrauensgrenze		$y^\triangleright$	1,791 4	1,782 5
Beste Schätzwert der Messgröße		$\hat{y}$	1,401 9	1,401 9
Standardunsicherheit zu $\hat{y}$		$u(\hat{y})$	0,198 7	0,194 2

D.4 Beispiel 3: Messung der volumenbezogenen Aktivität und deren Zunahme während der Anreicherung auf einem Filter

Ein radiochemisches Laboratorium arbeite ausschließlich mit ^{131}I . Gesetzlichen Vorgaben zufolge soll die volumenbezogene Aktivität der Abluft den Wert 20 Bq m^{-3} nicht überschreiten dürfen. Um die Einhaltung dieser Bedingung zu überwachen, wird ein Teil der Abluft durch ein Filter geleitet. Die Aktivität des Filters wird fortlaufend in Messintervallen der Dauer t mit einem zählenden Messinstrument gemessen. Es liegt also ein Fall nach B.5 vor. Als Messgröße Y interessiert einerseits die volumenbezogene Aktivität $A_{V,j}$ der Abluft während des Messintervalls j (siehe B.5.2) und andererseits auch die Zunahme $\Delta A_{V,j}$ der volumenbezogenen Aktivität $A_{V,j}$ im Vergleich zur mittleren volumenbezogenen Aktivität $\bar{A}_{V,j}$ aus m vorangegangenen Messintervallen (siehe B.5.3). Dafür sollen jeweils die charakteristischen Grenzen, der beste Schätzwert und die zugehörige Standardunsicherheit berechnet werden.

Das Modell für die volumenbezogene Aktivität $A_{V,j}$ ist in Gleichung (B.19) angegeben, das Modell für die Zunahme $\Delta A_{V,j}$ der volumenbezogenen Aktivität in Gleichung (B.27). Sie unterscheiden sich formal nicht voneinander, es wird lediglich X_2 in B.5.2 und B.5.3 unterschiedlich aufgefasst und angesetzt.

Zu allen Eingangsdaten, Vorgaben, einigen Zwischenwerten und Ergebnissen siehe Tabelle D.3. Es liegen die Anzahlen n_j von 26 Messintervallen von $j = 0$ bis 25 vor. Das Messintervall $j = 25$ soll untersucht werden. Deshalb wird $m = 24$ gesetzt, und es werden nur die Anzahlen n_j für $j = 25, 24$ und 0 benötigt, die zugehörigen Standardunsicherheiten $u(n_j) = \sqrt{n_j}$ jedoch nicht explizit. Zu den Ansätzen der Werte x_1 und $u^2(x_1)$ für X_1 sowie x_2 und $u^2(x_2)$ für X_2 siehe B.5. Als Richtwert wurde $y_r = 2 \text{ Bq m}^{-3}$ für $A_{V,j}$ angesetzt, um volumenbezogene Aktivitäten von wenigstens 10 % der gesetzlichen Vorgabe noch erkennen zu können. Für $\Delta A_{V,j}$ wurde der Richtwert $y_r = 0,2 \text{ Bq m}^{-3}$ gewählt, um rechtzeitig technische Maßnahmen zur Verminderung der volumenbezogenen Aktivität unter 10 % der gesetzlichen Vorgabe einleiten zu können. Die Ergebnisse wurden aufgrund der genannten Modelle nach Anhang A und B.5, insbesondere unter Verwendung der Gleichungen (B.19) bis (B.29) berechnet. Bei $j = 25$ in B.5.2 wurden wegen $y \geq 4u(y)$ die Näherungen nach den Gleichungen (32) und (35) verwendet.

Nur für die Normung

Tabelle D.3 – Eingangsdaten, Zwischenwerte und Ergebnisse zu Beispiel 3

Eingangsdaten und Vorgaben			
Größe	Formelzeichen	Wert	Standard-unsicherheit
Anzahl registrierter Ereignisse in den Messintervallen 25, 24 und 0 ($j = 25$)	$n_j = 25$ $n_{j-1} = 24$ n_0	15 438 14 356 2 124	
Dauer eines Messintervalls	t	3 600 s	Vernachlässigt
Volumen	V mit $u(V)$	3,00 m ³	0,01 m ³
Kalibrierfaktor	ε mit $u(\varepsilon)$	0,37	0,02
Wahrscheinlichkeit	α, β, γ	0,05	–
Richtwert für $A_{V,j}$ und $\Delta A_{V,j}$	y_r	2,0 und 0,2 Bq m ⁻³	–
Zwischenwerte			
Größe und Berechnung		Wert	Standard-unsicherheit
x_2 mit $u(x_2)$	nach Gleichung (B.21) für B.5.2	3 987,8 Bq	0,033 3 Bq
	nach Gleichung (B.29) für B.5.3	4 129,4 Bq	0,034 7 Bq
Ergebnisse			
Größe	Messgröße: Y Formelzeichen	$A_{V,25}$ (B.5.2) Wert in Bq m ⁻³	$\Delta A_{V,25}$ (B.5.3)
Primäres Messergebnis	y	0,270 8	0,143 2
Standardunsicherheit zu y	$u(y)$	0,045 6	0,044 8
Erkennungsgrenze	y^*	0,069 7	0,071 8
Messeffekt erkannt?	$y > y^*$?	Ja	Ja
Nachweisgrenze	$y^\#$	0,141 3	0,145 5
Messverfahren für Messzweck geeignet?	$y^\# \leq y_r$?	Ja	Ja
Untere Vertrauensgrenze	$y^\triangleleft$	0,181 4	0,056 0
Obere Vertrauensgrenze	$y^\triangleright$	0,360 2	0,231 0
Bester Schätzwert der Messgröße	$\hat{y}$	0,270 8	0,143 3
Standardunsicherheit zu $\hat{y}$	$u(\hat{y})$	0,045 6	0,044 6

D.5 Beispiele 4 und 5: Messung der spezifischen Aktivität über die Intensität einer Linie mit schwach gekrümmtem Untergrund in einem Gammaspektrum

D.5.1 Beispiel 4: Messung mit Germanium-Detektor

Im Gammaspektrum einer Bodenprobe, das mittels eines Germaniumdetektors registriert wurde, liegt bei Kanal 927 auf dominierendem, schwach gekrümmtem Untergrund eine dem zu ermittelnden Nuklid zuzuordnende Linie. Messgröße Y ist die spezifische Aktivität A_M der Probe (Aktivität geteilt durch Masse der Probe, siehe ISO 31-9), zu berechnen aus der Nettointensität (Nettofläche) der Linie. Für diese Messgröße sind die charakteristischen Grenzen, der beste Schätzwert und die zugehörige Standardunsicherheit zu ermitteln.

Es liegt Fall c) von C.2 vor. Aufgrund der Energiekalibrierung beträgt die energetische Breite eines Kanals 0,499 5 keV und die energetische Halbwertsbreite der Linie 2,0 keV, was einer Halbwertsbreite von $h = 4,00$ Kanälen entspricht. Nach Gleichung (C.10) ist $t_g \approx 1,2 h = 4,8$ als Breite des Bereiches B zu setzen. Es wird deshalb als Bereich B (siehe Bild C.1) der zum Kanal 927 symmetrisch gelegene Bereich der Kanäle 925 bis 929 mit der Breite $t_g = 5$ festgelegt. Er überdeckt dadurch in diesem Fall etwa den Anteil $f = 86\%$ der Linienfläche (siehe auch unter Gleichung (C.10)).

Für die vier Bereiche A_i zur Ermittlung des schwach gekrümmten Untergrundes, die beidseitig an den Bereich B anschließen, wird nach C.3 jeweils die Breite $t = 13$ gewählt. Die Gesamtbreite beträgt also $t_0 = 52$. Einer Vergrößerung der Breite steht eine andere mögliche Linie bei Kanal 958 mit gleicher Halbwertsbreite entgegen. Diese Linie liegt daher in den Kanälen 956 bis 960. Somit stehen für die Bereiche A_3 und A_4 maximal die 26 Kanäle 930 bis 955 zur Verfügung.

Zu den Eingangsdaten, Vorgaben, einigen Zwischenwerten und Ergebnissen siehe Tabelle D.4. Die Ergebnisse wurden aufgrund des folgenden Modells nach Anhang A und C.2 berechnet. Insbesondere wurden die Gleichungen (C.3), (C.4), (C.5), (C.10) und (C.12) verwendet. Das Modell lautet

$$Y = A_M = \frac{X_1 - X_2}{X_5 X_7 X_9 X_{11} X_{13}} = \frac{X_g - Z_0}{T f M \varepsilon i} \quad (\text{D.5})$$

Dabei sind $X_1 = X_g$ der Schätzer des Bruttoeffektes im Bereich B , $X_2 = Z_0$ der Schätzer des Nulleffektes, d. h. des Untergrundbeitrags zur Linie im Bereich B , und $X_5 = T$ die Messdauer. Der Korrekturfaktor $X_7 = f$ berücksichtigt, dass der Bereich B die Linie bei dominierendem Untergrund nicht vollständig überdeckt. Zu f siehe oben und unter Gleichung (C.10). Die Standardunsicherheit von f wurde vernachlässigt, weil f , wenn nötig, beliebig genau berechnet werden kann. Weiterhin sind $X_9 = M$ die Masse der Probe, $X_{11} = \varepsilon$ die Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors, gemessen mit $f = 1$, und $X_{13} = i$ die Photonen-Emissionswahrscheinlichkeit der Gammastrahlung. Die Werte von M und ε und die zugehörigen Standardunsicherheiten $u(M)$ bzw. $u(\varepsilon)$ wurden in Vorversuchen ermittelt. Der Wert von i und die zugehörige Standardunsicherheit $u(i)$ wurden einem Tabellenwerk mit Zerfallsdaten radioaktiver Nuklide entnommen. Der Richtwert y_r ist in einer Richtlinie zur Überwachung der Umweltradioaktivität vorgegeben.

Für X_1 wurden als Werte $x_1 = n_g$ und $u^2(x_1) = n_g$ angesetzt (siehe C.1 und F.1). Zu beachten ist dabei, dass $X_1 = X_g$ hier keine Zählrate, sondern den Parameter einer Poisson-Verteilung schätzt. Darum steht die Messdauer T im Nenner von Gleichung (D.5). Zu den Werten z_0 und $u^2(z_0)$ für $X_2 = Z_0$ siehe Gleichung (C.12).

D.5.2 Beispiel 5: Messung mit Natrium-Iodid-Detektor

Bild C.1 zeigt den Ausschnitt eines Gammaspektrums, das mittels eines NaI-Detektors registriert wurde. Eine zu betrachtende Linie mit ihrer Mitte $\bar{g}_g$ bei Kanal 500 liegt auf nicht dominierendem, schwach gekrümmtem Untergrund. Messgröße Y ist die Nettointensität I (Nettofläche) der Linie. Für diese Messgröße sind ebenfalls die charakteristischen Grenzen, der beste Schätzwert und die zugehörige Standardunsicherheit zu ermitteln.

Wieder liegt Fall c) von C.2 vor. Die Halbwertsbreite der Linie beträgt etwa $h = \sigma\sqrt{8\ln 2} = 32,45$ Kanäle, was als Ergebnis aus Beispiel 6 in D.5.3 folgt. Nach Gleichung (C.9) ist daher $t_g \approx 2,5h = 81$ als Breite des Bereiches B zu setzen. Es wird deshalb als Bereich B (siehe Bild C.1) der zum Kanal 500 symmetrisch gelegene Bereich der Kanäle 461 bis 539 mit der Breite $t_g = 79$ festgelegt. Er überdeckt dadurch nahezu $f = 100\%$ der Linienfläche.

Für die vier Bereiche A_i zur Ermittlung des schwach gekrümmten Untergrundes, die beidseitig an den Bereich B anschließen, wird nach C.3 jeweils die Breite $t = 21$ gewählt. Die Gesamtbreite beträgt also $t_0 = 4t = 84$. Einer Vergrößerung der Breite steht der Anstieg des Untergrundes unterhalb Kanal 419 sowie oberhalb Kanal 581 durch die zweite in Bild C.1 gezeigte Linie entgegen.

Zu den Eingangsdaten, Vorgaben, einigen Zwischenwerten und Ergebnissen siehe Tabellen D.4 und D.5. Die Ergebnisse wurden aufgrund des folgenden Modells wie in Beispiel 4 berechnet. Das Modell hat hier eine einfachere Form und lautet

$$Y = I = X_1 - X_2 = X_g - Z_0 \quad (\text{D.6})$$

so dass $w = 1$ und $u_{\text{rel}}(w) = 0$. Zu den Eingangsgrößen $X_1 = X_g$ und $X_2 = Z_0$ siehe ebenfalls Beispiel 4. Ein Richtwert ist nicht vorgegeben. Es ergibt sich $y \geq 4u(y)$. Deshalb wurden die Näherungen nach den Gleichungen (32) und (35) verwendet.

Wie in Bild C.1 dargestellt, wurden an den Untergrund des Spektrums in den Bereichen A_i nach C.3 sowohl eine Gerade mit $m = 2$ [Fall b)] als auch eine kubische Parabel mit $m = 4$ [Fall c)] angepasst. Für die Gerade wurden die Bereiche A_1 und A_2 sowie die Bereiche A_3 und A_4 jeweils zusammengefasst. Mit $M = t_0 = 84$ und $\delta = 0,05$ folgt nach Gleichung (C.14) das standardisierte Chi-Quadrat $\chi_s^2 = |\chi^2 - M + m| / \sqrt{2(M - m)} = 2,71 > k_{1-\delta/2} = 1,96$ für die Gerade, jedoch mit dem Wert $0,41 < 1,96$ für die Parabel. Die Gerade ist demnach nicht akzeptabel, weil sie die Chi-Quadrat-Bedingung nicht erfüllt.

Nur für die Normenkommission

Tabelle D.4 – Eingangsdaten, Zwischenwerte und Ergebnisse zu den Beispielen 4, 5 und 6

Eingangsdaten und Vorgaben zu Beispiel 4			
Größe	Formelzeichen	Wert	Kanäle
Energetische Kanalbreite		0,499 5 keV	
Energetische Halbwertsbreite der Linie		2,0 keV	
Anzahl registrierter Ereignisse im			
Bereich A_1	n_1	3 470	899 bis 911
Bereich A_2	n_2	3 373	912 bis 924
Bereich B	n_g	1 440	925 bis 929
Bereich A_3	n_3	3 343	930 bis 942
Bereich A_4	n_4	3 208	943 bis 955
Breite eines Bereichs A_i	t	13	
Breite eines Bereichs B	t_g	5	
Standardunsicherheit			
Messdauer	T	21 600 s	Vernachlässigt
Korrektionsfaktor	f	0,858 5	Vernachlässigt
Probenmasse	M mit $u(M)$	1,000 kg	0,001 kg
Nachweiswahrscheinlichkeit	ε mit $u(\varepsilon)$	0,060	0,004
Photonen-Emissionswahrscheinlichkeit	i mit $u(i)$	0,98	0,02
Wahrscheinlichkeiten	α, β, γ	0,05	–
Richtwert	y_r	0,5 Bq kg ⁻¹	–
Eingangsdaten und Vorgaben zu Beispiel 5 und 6			
Größe	Formelzeichen	Wert	Kanäle, Bemerkungen
Halbwertsbreite der Linie	h	32,45	Ergebnisse für Beispiel 6
Anzahl registrierter Ereignisse im			
Bereich A_1	n_1	17 326	419 bis 439
Bereich A_2	n_2	17 291	440 bis 460
Bereich B	n_g	84 221	461 bis 539
Bereich A_3	n_3	12 069	540 bis 560
Bereich A_4	n_4	11 434	561 bis 581
Breite eines Bereichs A_i	t	21	
Breite des Bereichs B	t_g	79	
Wahrscheinlichkeiten	α, β, γ	0,05	
Richtwert	y_r	–	Nicht vorgegeben

Tabelle D.4 (fortgesetzt)

Zwischenwerte		Beispiel 4	Beispiel 5	
Größe und Berechnung		Wert	Wert	
$n_0 = n_1 + n_2 + n_3 + n_4$		13 394	58 120	
$n'_0 = n_1 - n_2 - n_3 + n_4$		−38	−600	
Gesamtbreite $t_0 = 4t$ der Bereiche A_i		52	84	
Untergrundbeitrag z_0 mit		1 293,2	56 120	
Standardunsicherheit $u(z_0)$ nach Gleichung (C.12)		19,7	631	
Zwischenwerte zu Beispiel 6				
Größe und Berechnung	Formelzeichen	Wert	Standardunsicherheit	
Standardabweichung der Linie durch Minimierung von χ_s^2	σ	13,78	Nicht berechnet	
Entfaltungsparameter y_k mit	$y_1 = y$	29 550,3	369,7	
Standardunsicherheit $u(y_k)$	y_2	−35,44	15,36	
nach Gleichungen	y_3	694,7	5,25	
(C.32) bis (C.34) und (C.36)	y_4	−4 035	0,576	
	y_5	$-1,71 \times 10^{-3}$	$1,45 \times 10^{-3}$	
	y_6	$2,60 \times 10^{-4}$	$5,80 \times 10^{-5}$	
Ergebnisse		Beispiel 4	Beispiel 5	Beispiel 6
Messgröße:	Y	A_M	I	I
Größe	Formelzeichen	Wert in Bq kg ^{−1}	Einheit 1	Einheit 1
Primäres Messergebnis	y	0,134 6	28 100	29 550
Standardunsicherheit zu y	$u(y)$	0,040 3	695	370
Erkennungsgrenze	y^*	0,061 9	1 109	488
Messeffekt erkannt?	$y > y^* ?$	Ja	Ja	Ja
Erkennungsgrenze	$y^\#$	0,127 9	2 220	980
Messverfahren für Messzweck geeignet?	$y^\# \leq y_r ?$	Ja	—	—
Untere Vertrauensgrenze	$y^\triangleleft$	0,055 8	26 739	28 826
Obere Vertrauensgrenze	$y^\triangleright$	0,213 7	29 462	30 275
Bester Schätzwert der Messgröße	$\hat{y}$	0,134 7	28 100	29 550
Standardunsicherheit zu $\hat{y}$	$u(\hat{y})$	0,040 2	695	370
Standardisiertes Chi-Quadrat	χ_s^2	—	0,41 (Parabel) 2,71 (Gerade)	0,78
Chi-Quadrat-Bedingung erfüllt?	$\chi_s^2 \leq k_{1-\delta/2} ?$	—	Ja (Parabel) Nein (Gerade)	Ja

Tabelle D.5 – Daten des Vielkanal-Spektrums zu den Beispielen 5 und 6

A_1		A_2		B		B		B		A_3		A_4	
i	x_i	i	x_i	i	x_i	i	x_i	i	x_i	i	x_i	i	x_i
419	872	440	817	461	850	487	1 219	513	1 250	540	584	561	570
420	867	441	817	462	807	488	1 301	514	1 164	541	604	562	543
421	830	442	792	463	817	489	1 401	515	1 146	542	579	563	519
422	865	443	804	464	797	490	1 399	516	1 119	543	548	564	495
423	822	444	788	465	795	491	1 346	517	1 078	544	559	565	564
424	787	445	815	466	811	492	1 452	518	1 049	545	588	566	554
425	812	446	854	467	827	493	1 426	519	1 010	546	617	567	566
426	799	447	817	468	784	494	1 430	520	956	547	576	568	543
427	860	448	875	469	829	495	1 550	521	920	548	607	569	533
428	832	449	857	470	872	496	1 503	522	901	549	580	570	540
429	807	450	773	471	855	497	1 486	523	880	550	585	571	572
430	823	451	828	472	868	498	1 561	524	823	551	599	572	546
431	838	452	850	473	895	499	1 501	525	782	552	598	573	549
432	833	453	812	474	965	500	1 611	526	745	553	606	574	553
433	795	454	818	475	888	501	1 471	527	703	554	555	575	528
434	806	455	872	476	915	502	1 608	528	742	555	572	576	585
435	815	456	804	477	887	503	1 551	529	690	556	566	577	560
436	793	457	865	478	1 002	504	1 545	530	721	557	545	578	518
437	837	458	820	479	1 008	505	1 408	531	684	558	501	579	567
438	807	459	792	480	1 064	506	1 486	532	683	559	529	580	509
439	826	460	821	481	1 033	507	1 464	533	678	560	571	581	520
				482	1 110	508	1 365	534	680				
				483	1 131	509	1 371	535	609				
				484	1 160	510	1 341	536	575				
				485	1 264	511	1 305	537	614				
				486	1 194	512	1 292	538	624				
								539	579				

i Kanalnummer

x_i Anzahl registrierter Ereignisse im Kanal i

A_k Bereiche für die Untergrundbestimmung

B Bereich für die Linie

D.5.3 Beispiel 6: Entfaltung eines Gamma-Spektrums

Das in Beispiel 5 ausgewertete und in Bild C.1 dargestellte Vielkanal-Spektrum wird auch nach Gleichungen (C.32) bis (C.34) und (C.36) linear entfaltet mit den gleichen Eingangsdaten aus den Tabellen D.4 und D.5. Dadurch können die Anwendungen beider Methoden verglichen werden. Die Ergebnisse werden in Tabelle D.4 und Bild C.1 dargestellt.

Die $n=6$ Anpassungsfunktionen nach Gleichung (C.36) werden benutzt, um die Ansprechmatrix A des Spektrometers zu bilden. Die Kanalnummer i wird als E interpretiert, die Energieskalierung. Die Standardabweichung σ der betrachteten Linie und der Parameter a der Stufenfunktion arctan sind nicht bekannt. Darum wird a zunächst als σ identifiziert und ein primärer Wert für σ geschätzt, der dann durch wiederholte lineare Entfaltungen variiert wird, bis das standardisierte Chi-Quadrat χ_s^2 minimal wird. Der auf diese Weise gewonnene Wert für σ wurde schon in Beispiel 5 für die Halbwertsbreite $h = \sigma\sqrt{8\ln 2}$ der Linie benutzt.

Die Schätzwerte x_i der Eingangsgrößen X_i sind die Ereigniszahlen in den $m=163$ individuellen Kanälen 419 bis 581 des Vielkanal-Spektrums (siehe Tabelle D.5). Diese formen die Spaltenmatrix $x = (x_1, \dots, x_m)^T$. Wegen der Poisson-Statistik und der Annahme, dass die Zählungen in den verschiedenen Kanälen unkorreliert sind, gilt weiterhin $u^2(x_i) = x_i$ und $u(x_i, x_j) = 0$ ($i \neq j$). Daraus wird die diagonale Unsicherheitsmatrix $U_x(x) = \text{diag}(x)$ gebildet. Die $n=6$ zu berechnenden Schätzwerte y_k der Messgröße sind die Werte der Koeffizienten Y_k der Anpassungsfunktion nach Gleichung (C.36) und bilden die Spaltenmatrix $y = (y_1, \dots, y_6)^T$. Die interessierende Messgröße Y ist die Netto-Linienintensität Y_1 aus Beispiel 5, d. h. $y = y_1$. Die Matrix-Gleichung des Modells zur Entfaltung lautet $x = A y$. Es zeigt sich, dass die Messgrößen y_k korreliert sind. In Tabelle D.4 sind jedoch nur die Standardunsicherheiten $u(y_k)$ der Ergebnisse y_k dargestellt, auf die assoziierten Korrelationskoeffizienten wurde verzichtet.

Die beiden Messergebnisse $y = y'$ und $y = y''$ in den Beispielen 5 und 6 unterscheiden sich deutlich. Ob der Unterschied wirklich signifikant ist oder nicht, zeigt folgende Betrachtung: Die Differenz $z = y' - y''$ zweier unabhängig voneinander bestimmter Schätzwerte y' und y'' derselben Messgröße ist ein Schätzwert der Größe Z mit dem wahren Wert 0. Dieser wahre Wert 0 sollte dann enthalten sein in dem Vertrauensintervall zwischen den Grenzen $z \pm k_{1-\gamma/2} \cdot u(z)$ mit $u(z) = \sqrt{u^2(y') + u^2(y')}$. Das führt zu der Bedingung $|z|/u(z) \leq k_{1-\gamma/2}$. Mit $\gamma = 0,05$ ergibt sich für die beiden Methoden der Beispiele 5 und 6, dass der Unterschied nicht signifikant ist, weil $|z|/u(z) = 1,84 < 1,96$.

Die Standardunsicherheiten $u(y)$ und die charakteristischen Grenzen der Beispiele 5 und 6 unterscheiden sich auch deutlich. Das kann darauf zurückgeführt werden, dass in Beispiel 6 die volle Information aus dem Spektrum berücksichtigt wird, während in Beispiel 5 nur die Summen in den Bereichen des Spektrums benutzt werden. Trotzdem stimmt der entfaltete Untergrund im Bereich B des Spektrums nahezu überein mit der (nicht akzeptierten) Annahme einer Geraden im Beispiel 5 (siehe Bild C.1). Der Grund dafür ist die geringe Rolle der Stufenfunktion arctan bei der Berechnung der Entfaltung.

Anhang E (informativ)

Verteilungsfunktion der standardisierten Normalverteilung

Die Verteilungsfunktion der standardisierten Normalverteilung ist definiert durch

$$\Phi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{v^2}{2}\right) dv = \frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^{2j+1}}{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2j+1)} \quad (\text{E.1})$$

und ihr Quantil k_p zur Wahrscheinlichkeit p durch $\Phi(k_p) = p$ (siehe [29]). Der zweite Ausdruck in Gleichung (E.1) kann der numerischen Berechnung von $\Phi(t)$ dienen. Die Reihe in Gleichung (E.1) konvergiert für jedes t . Werte für $\Phi(t)$ sind in Tabelle E.1 angegeben. Es gelten die Beziehungen $\Phi(-t) = 1 - \Phi(t)$ und $k_{1-p} = -k_p$.

Das Quantil k_p der standardisierten Normalverteilung kann nach dem Newton'schen Iterationsverfahren wie folgt numerisch berechnet werden: Mit einer Näherung t für k_p ergibt sich eine verbesserte Näherung t' durch

$$t' = t + \sqrt{2\pi} \exp(t^2/2) [p - \Phi(t)] \quad (\text{E.2})$$

Als Anfangsnäherung kann $t = 0$ gewählt werden.

Nur für die Normungsschritte

Tabelle E.1 – Verteilungsfunktion $\Phi(t)$ der standardisierten Normalverteilung

t	$\Phi(t)$	t	$\Phi(t)$	t	$\Phi(t)$	t	$\Phi(t)$	t	$\Phi(t)$
0,00	0,500 0	0,60	0,725 8	1,20	0,884 9	1,80	0,964 1	2,40	0,991 8
0,02	0,508 0	0,62	0,732 4	1,22	0,888 8	1,82	0,965 6	2,42	0,992 2
0,04	0,516 0	0,64	0,738 9	1,24	0,892 5	1,84	0,967 1	2,44	0,992 7
0,06	0,523 9	0,66	0,745 4	1,26	0,896 1	1,86	0,968 6	2,46	0,993 0
0,08	0,531 9	0,68	0,751 8	1,28	0,899 7	1,88	0,970 0	2,48	0,993 4
0,10	0,539 8	0,70	0,758 0	1,30	0,903 2	1,90	0,971 3	2,50	0,993 8
0,12	0,547 8	0,72	0,764 2	1,32	0,906 6	1,92	0,972 6	2,52	0,994 1
0,14	0,555 7	0,74	0,770 4	1,34	0,909 9	1,94	0,973 8	2,54	0,994 5
0,16	0,563 6	0,76	0,776 4	1,36	0,913 1	1,96	0,975 0	2,56	0,994 8
0,18	0,571 4	0,78	0,782 3	1,38	0,916 2	1,98	0,976 2	2,58	0,995 1
0,20	0,579 3	0,80	0,788 1	1,40	0,919 2	2,00	0,977 2	2,60	0,995 3
0,22	0,587 1	0,82	0,793 9	1,42	0,922 2	2,02	0,978 3	2,62	0,995 6
0,24	0,594 8	0,84	0,799 6	1,44	0,925 1	2,04	0,979 3	2,64	0,995 9
0,26	0,602 6	0,86	0,805 1	1,46	0,927 8	2,06	0,980 3	2,66	0,996 1
0,28	0,610 3	0,88	0,810 6	1,48	0,930 6	2,08	0,981 2	2,68	0,996 3
0,30	0,617 9	0,90	0,815 9	1,50	0,933 2	2,10	0,982 1	2,70	0,996 5
0,32	0,625 5	0,92	0,821 2	1,52	0,935 7	2,12	0,983 0	2,72	0,996 7
0,34	0,633 1	0,94	0,826 4	1,54	0,938 2	2,14	0,983 8	2,74	0,996 9
0,36	0,640 6	0,96	0,831 5	1,56	0,940 6	2,16	0,984 6	2,76	0,997 1
0,38	0,648 0	0,98	0,836 5	1,58	0,943 0	2,18	0,985 4	2,78	0,997 3
0,40	0,655 4	1,00	0,841 3	1,60	0,945 2	2,20	0,986 1	2,80	0,997 4
0,42	0,662 8	1,02	0,846 1	1,62	0,947 4	2,22	0,986 8	2,90	0,998 1
0,44	0,670 0	1,04	0,850 8	1,64	0,949 5	2,24	0,987 4	3,00	0,998 6
0,46	0,677 2	1,06	0,855 4	1,66	0,951 5	2,26	0,988 1	3,10	0,999 0
0,48	0,684 4	1,08	0,859 9	1,68	0,953 5	2,28	0,988 7	3,20	0,999 3
0,50	0,691 5	1,10	0,864 3	1,70	0,955 4	2,30	0,989 3	3,30	0,999 5
0,52	0,698 5	1,12	0,868 6	1,72	0,957 3	2,32	0,989 8	3,40	0,999 7
0,54	0,705 4	1,14	0,872 9	1,74	0,959 1	2,34	0,990 4	3,50	0,999 8
0,56	0,712 3	1,16	0,877 0	1,76	0,961 0	2,36	0,990 9	3,60	0,999 8
0,58	0,719 0	1,18	0,881 0	1,78	0,962 5	2,38	0,991 3	3,80	0,999 9
								$\geq 4,00$	1,000 0
ANMERKUNG Für $\Phi(t) = p$ ist $k_p = t$ das Quantil zur Wahrscheinlichkeit p . Es gelten $\Phi(-t) = 1 - \Phi(t)$ und $k_{1-p} = -k_p$.									

Anhang F (informativ)

Erläuterungen

F.1 Allgemeines zu zählenden Messungen

Eine Kernstrahlungsmessung besteht im Allgemeinen wenigstens teilweise darin, durch Kernstrahlungsereignisse ausgelöste elektronische Impulse zu zählen, wobei eine solche zählende Messung mehrere einzelne Zählungen umfasst, aber auch Folgen einzelner Zählungen umfassen kann. Beispiele dafür sind die Zählungen an einzelnen Proben radioaktiven Materials oder an einzelnen Blindproben, Zählungen zur Ermittlung des Nulleffektes oder eines Untergrundes, die Zählungen in den einzelnen Kanälen eines Vielkanal-Spektrums oder in einer zeitlichen Folge in derselben Messsituation. Bei jeder Zählung kann entweder die Messdauer (Zeitvorwahl) oder das Zählergebnis (Impulsvorwahl) vorgewählt sein. Auf der Grundlage der Bayes-Statistik werden alle Zählungen auf gleiche Weise wie folgt behandelt (siehe [17]).

Die Impulsanzahl N jeder einzelnen Zählung wird als eine eigene Zufallsvariable aufgefasst. n ist das Zählergebnis und t die Dauer der Zählung (Messdauer). N besitzt den Erwartungswert $\rho \cdot t$, wobei ρ die Zählrate oder bei Spektrumsmessungen die spektrale Dichte ist. In letzterem Fall ist t die Kanalbreite bezüglich der zugeordneten Größe, z. B. der Teilchenenergie. Messgröße ist entweder ρ oder $\rho \cdot t$. Es wird vorausgesetzt, dass während der Zählung Totzeit- und Lebensdauereffekte, Aufstöcken (Pile-up) der Impulse und instrumentelle Instabilitäten vernachlässigt werden können und alle gezählten Impulse verschiedenen Kernstrahlungsereignissen entstammen, die voneinander physikalisch unabhängig sind. Dann besitzt die Impulsanzahl N eine Poisson-Verteilung, und die Impulsanzahlen der einzelnen Zählungen sind unabhängig.

Unabhängig davon, ob n Impulse während einer vorgewählten Messdauer (oder bei fester Kanalbreite) t registriert werden (Zeitvorwahl) oder ob die für die Zählung einer vorgewählten Impulsanzahl n benötigte Messdauer t gemessen wird (Impulsvorwahl), besitzt ρ , wobei ρ als Zufallsvariable aufgefasst wird, eine Gammaverteilung [38], [39]. Daraus folgen für die Zählrate (oder spektrale Dichte) der beste Schätzwert r und die zu r gehörende Standardunsicherheit $u(r)$ mit

$$r = E(\rho) = n/t; \quad u^2(r) = \text{Var}(\rho) = n/t^2 = r/t \quad (\text{F.1})$$

Der Fall $n=0$ ergibt $u(r)=0$. Diese verschwindende Unsicherheit von ρ bedeutet, dass $\rho=0$ exakt gilt. $u(r)=0$ ist jedoch unrealistisch, weil bei endlicher Messdauer keineswegs sicher sein kann, dass exakt $\rho=0$, wenn lediglich kein Impuls registriert wird. Dieser Fall kann auch bei Anwendung der Methode der kleinsten Quadrate nach ISO/IEC GUIDE 98-3 (siehe auch Literaturhinweise [1], [2]), wenn durch $u^2(r)$ zu dividieren ist, auf eine Division durch null führen. Diese Schwierigkeit kann durch Ersetzen aller Zählergebnisse n durch $n+1$ oder bei einem Vielkanal-Spektrum durch geeignetes Zusammenfassen von Kanälen vermieden werden. Dabei wird vorausgesetzt, dass die Messdauer (oder Kanalbreite) aus der Erfahrung so gewählt wird, dass wenigstens einige Impulse erwartet werden können, wenn $\rho > 0$ ist.

F.2 Bayes-Statistik bei Messungen

F.2.1 Spezielle Größen und Formelzeichen in F.2

- $f(y|\tilde{y})$ Wahrscheinlichkeitsverteilung; bedingte Wahrscheinlichkeit, einen Messwert y zu erhalten, wenn ein wahrer Wert $\tilde{y}$ der Messgröße Y vorliegt
- $f(\tilde{y}|y)$ Wahrscheinlichkeitsverteilung; bedingte Wahrscheinlichkeit, dass ein wahrer Wert $\tilde{y}$ vorliegt, gegeben ein gemessener Schätzwert y (Bayes-Statistik)
- $f_0(\tilde{y}|y)$ Likelihood; Wahrscheinlichkeitsverteilung dafür, dass die Messgröße Y den wahren Wert $\tilde{y}$ hat, wenn nur der Messwert y und die zugeordnete Unsicherheit $u(y)$ gegeben sind
- $f(\tilde{y})$ Modell-Prior; er repräsentiert all jene Informationen über die Messgröße, die vor der Durchführung des Experiments existierten

F.2.2 Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Auf der Grundlage der Bayes-Statistik [8] und der Bayes-Theorie über Messunsicherheiten [6], [7], [16], [17] werden die charakteristischen Grenzen (d. h. die Erkennungsgrenze, die Nachweisgrenze und die Vertrauensgrenzen) unter Berücksichtigung aller Quellen von Unsicherheiten berechnet. Dazu muss zunächst die Messung gemäß ISO/IEC GUIDE 98-3 vollständig ausgewertet werden. Anschließend folgt die Ermittlung der charakteristischen Grenzen unter Verwendung der Standardunsicherheiten, die aus der Messung gewonnen werden. Die Bayes-Statistik erlaubt eine konsistente Behandlung nach ISO/IEC GUIDE 98-3 für beide Typen von Unsicherheiten, nämlich vom Typ A und vom Typ B. Darin besteht der Unterschied zur konventionellen (frequentistischen) Statistik, die Unsicherheiten vom Typ B nicht berücksichtigen kann.

Der grundlegende Unterschied zwischen konventioneller und Bayes Statistik besteht in der unterschiedlichen Verwendung des Begriffs Wahrscheinlichkeit. In Bezug auf Messungen betrachtet die konventionelle Statistik die Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(y|\tilde{y})$, d. h. die bedingte Verteilung von Schätzwerten y unter der Annahme eines wahren Wertes $\tilde{y}$ der Messgröße Y . Der wahre Wert einer Messgröße ist jedoch prinzipiell unbekannt, weil genau das die Aufgabe eines Experiments ist, nämlich Aussagen über den Wert einer Messgröße zu gewinnen. Die Bayes-Statistik dagegen erlaubt die Berechnung der Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(\tilde{y}|y)$, das ist die Verteilung des wahren Wertes $\tilde{y}$ der Messgröße Y unter Berücksichtigung gemessener Schätzwerte y . Die Messunsicherheiten und die charakteristischen Grenzen basieren auf den Verteilungen $f(y|\tilde{y})$ und $f(\tilde{y}|y)$. Diese Verteilungen hängen von weiteren Bedingungen und Informationen ab, wie z. B. vom Modell, von Messdaten und den zugeordneten Unsicherheiten.

Um die Verteilung $f(\tilde{y}|y)$ aufzustellen, wird folgender Ansatz verwendet, der die Informationen über die Messgröße, die aus dem aktuellen Experiment gewonnen werden, abtrennt von anderen verfügbaren Informationen über die Messgröße:

$$f(\tilde{y}|y) = C \cdot f_0(\tilde{y}|y) \cdot f(\tilde{y}) \quad (\text{F.2})$$

Die Verteilung $f_0(\tilde{y}|y)$, genannt Likelihood, ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung dafür, dass die Messgröße Y einen wahren Wert $\tilde{y}$ hat, wenn nur der Messwert y und die zugeordnete Unsicherheit $u(y)$ gegeben sind. Es werden nur die Messwerte berücksichtigt, und alle übrigen Informationen über die Messgröße bleiben unbeachtet. Die Verteilung $f(\tilde{y})$, genannt Modell-Prior, enthält dagegen alle Informationen über die Messgröße, die vor der Durchführung der Messung zur Verfügung standen. Darum hängt $f(\tilde{y})$ nicht von y ab. C ist eine Normalisierungskonstante.

Wenn z. B. als Messgröße die Aktivität einer Strahlungsquelle oder die Konzentration eines Elements betrachtet wird, dann gibt es bereits vor der Durchführung der Messung die sinnvolle Information, dass die Messgröße nichtnegativ ist ($\tilde{y} \geq 0$). Das bedeutet für $f(\tilde{y})$:

$$f(\tilde{y}) = \begin{cases} \text{const} & (\tilde{y} \geq 0) \\ 0 & (\tilde{y} < 0) \end{cases} \quad (\text{F.3})$$

Zu beachten ist, dass ein aktuelles Messergebnis, z. B. eine Nettozählrate, negativ sein kann. Aber der Experimentator weiß a priori auch ohne ein Experiment durchzuführen, dass der wahre Wert $\tilde{y}$ nichtnegativ ist. Alle nichtnegativen Werte der Messgröße haben die gleiche A-priori-Wahrscheinlichkeit, wenn weiter keine Information zur Verfügung steht, bevor die Messung ausgeführt wird.

Die Likelihood $f_0(\tilde{y}|y)$ enthält im Wesentlichen die experimentellen Informationen. Darum gilt für den Erwartungswert bzw. die Varianz $E_0(\tilde{y}|y) = y$ bzw. $\text{Var}_0(\tilde{y}|y) = u^2(y)$ für diese Wahrscheinlichkeitsverteilung $f_0(\tilde{y}|y)$.

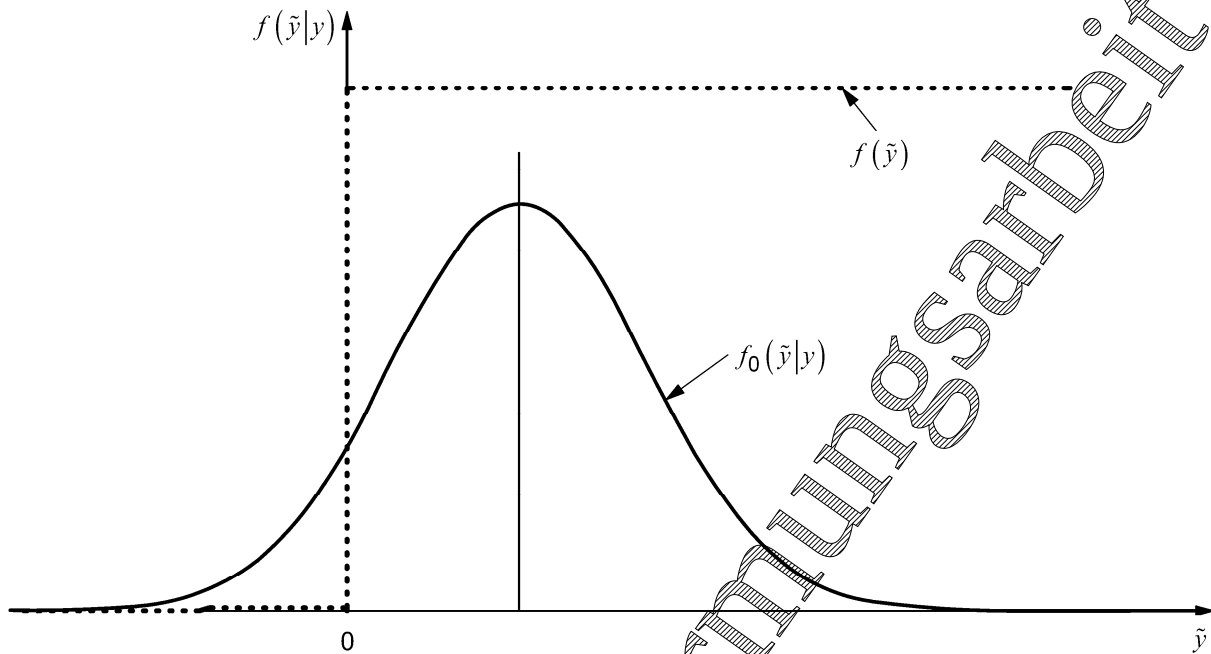
Nach [6], [16] kann die Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(\tilde{y}|y)$ durch Anwendung des Prinzips der maximalen Informations-Entropie S ermittelt werden (siehe [17]):

$$S = - \int f_0(\tilde{y}|y) \cdot f(\tilde{y}) \cdot \ln[f_0(\tilde{y}|y)] d\tilde{y} = \max \quad (\text{F.4})$$

Gleichung (F.4) kann unter den Vorgaben $E_0(\tilde{y}|y) = y$ und $\text{Var}_0(\tilde{y}|y) = u^2(y)$ aus der Likelihood $f_0(\tilde{y}|y)$ mittels der Multiplikatoren-Methode von Lagrange gelöst werden und liefert als Ergebnis:

$$f(\tilde{y}|y) = C \cdot f(\tilde{y}) \cdot \exp\left\{-\frac{(\tilde{y} - y)^2}{2 \cdot u^2(y)}\right\} \quad (\text{F.5})$$

Gleichung (F.5) bedeutet, dass die Verteilung $f(\tilde{y}|y)$ als Produkt aufgestellt ist aus dem Modell-Prior und einer Gaußschen Normalverteilung $N(y, u(y))$, d. h. die Verteilung ist eine abgeschnittene Gauß-Verteilung (Bild F.1). Zu beachten ist, dass die Gauß-Verteilung in Gleichung (F.5) keine Näherung ist, wie es der Fall ist in der konventionellen Statistik für Messwerte aus wiederholten oder zählenden Messungen. Stattdessen ist die Gauß-Verteilung das genaue Ergebnis der Maximierung der Informations-Entropie und drückt den Stand des beschränkten Wissens über die Messgröße Y aus.



Legende

- $\tilde{y}$ wahrer Wert der Messgröße Y
 $f(\tilde{y}|y)$ Wahrscheinlichkeitsverteilung des wahren Wertes $\tilde{y}$ der Messgröße Y , gegeben der Schätzwert y

Kurven siehe Text.

Bild F.1 – Illustration der Wahrscheinlichkeitsverteilung nach Gleichung (F.5) für eine nicht negative Messgröße Y

Nach der Betrachtung von $f(\tilde{y}|y)$, kann das Bayes-Theorem auch benutzt werden, um die Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(y|\tilde{y})$ für einen Schätzwert y darzustellen, wenn der wahre Wert $\tilde{y}$ der Messgröße Y gegeben ist:

$$f(y|\tilde{y}) \cdot f(\tilde{y}) = f(\tilde{y}|y) \cdot f(y) \quad (\text{F.6})$$

Die Verteilung $f(y)$ ist konstant für alle möglichen Messergebnisse y , bevor eine Messung ausgeführt wird, und $f(\tilde{y})$ ist konstant für alle $\tilde{y} \geq 0$ nach Gleichung (F.3). Darum kann $f(y|\tilde{y})$ aus den Gleichungen (F.5) und (F.6) hergeleitet werden, indem die jetzt noch nicht verfügbare Messunsicherheit $u(y)$ durch eine Funktion $\tilde{u}(\tilde{y})$ angenähert wird.

$$f(y|\tilde{y}) = C \cdot \exp\left\{-\frac{(y - \tilde{y})^2}{2 \cdot \tilde{u}^2(\tilde{y})}\right\} \quad (\tilde{y} \geq 0) \quad (\text{F.7})$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(y|\tilde{y})$ ist eine Gauß-Verteilung für einen gegebenen wahren Wert $\tilde{y}$ der Messgröße Y mit der Standardunsicherheit $\tilde{u}(\tilde{y})$. Zu beachten ist, dass der wahre Wert $\tilde{y}$ jetzt in Gleichung (F.7) ein Parameter ist, und dass die Varianz $u^2(y)$ der Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(\tilde{y}|y)$ als Varianz $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ der Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(y|\tilde{y})$ ausgedrückt wird:

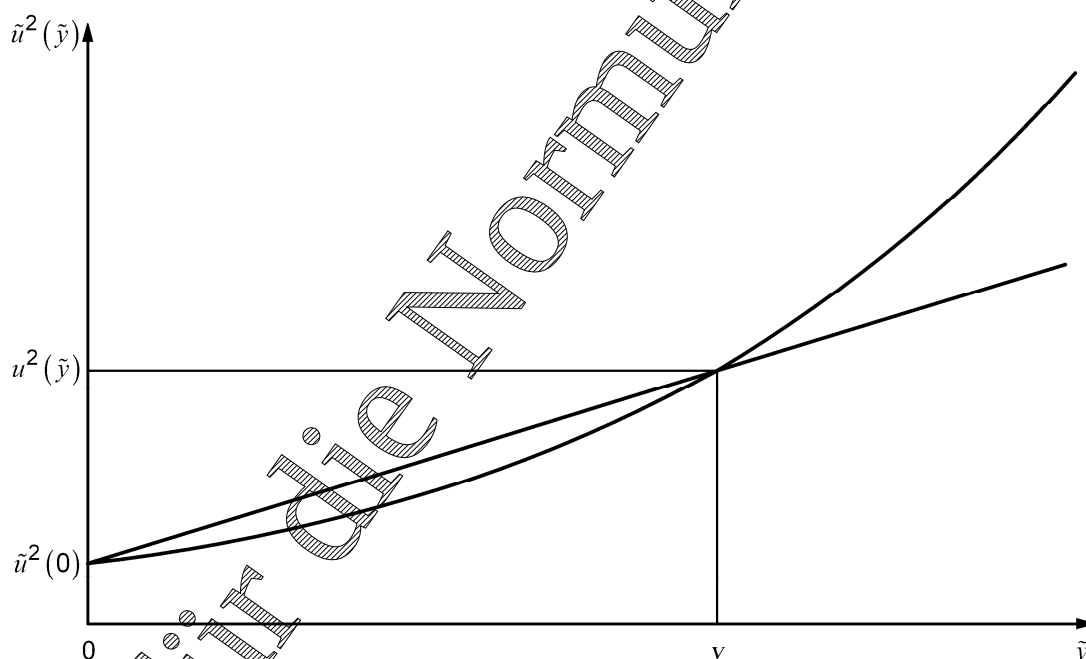
$$u^2(y) \equiv \tilde{u}^2(\tilde{y}) \quad (\text{F.8})$$

F.2.3 Berechnung der Standardunsicherheit als Funktion des wahren Wertes der Messgröße

Für die numerische Berechnung der Erkennungsgrenze und der Nachweisgrenze wird die Standardunsicherheit der Messgröße als Funktion $\tilde{u}(\tilde{y})$ des wahren Wertes $\tilde{y} \geq 0$ gebraucht. Diese Funktion ist ähnlich wie $u(y)$ im Zusammenhang mit der Auswertung der Messung nach ISO/IEC GUIDE 98-3 (siehe auch Literaturhinweise [1], [2]) zu bestimmen. In den meisten Fällen wird $\tilde{u}(\tilde{y})$ als positive Quadratwurzel der Varianz-Funktion $\tilde{u}^2(\tilde{y})$, die zuerst mit $f(y|\tilde{y})$ berechnet wird, ermittelt:

$$\tilde{u}^2(\tilde{y}) = \text{Var}(y|\tilde{y}) \quad (\text{F.9})$$

Diese Funktion muss definiert, eindeutig und stetig für alle $\tilde{y} \geq 0$ sein und darf keine negativen Werte annehmen. In einigen Fällen kann $\tilde{u}(\tilde{y})$ explizit angegeben werden, vorausgesetzt, dass $u(x_1)$ als Funktion $h_1(x_1)$ von x_1 gegeben ist. In diesen Fällen wird y ersetzt durch $\tilde{y}$, und Gleichung (2) muss für den Schätzwert x_1 der Eingangsgröße X_1 gelöst werden. Diese Größe X_1 wird im Folgenden immer als Erkennungsgröße betrachtet. Mit einem vorgegebenen Wert $\tilde{y}$ kann der Wert x_1 auch numerisch aus Gleichung (2) berechnet werden, z. B. mittels einer Interpolationsprozedur, die x_1 als Funktion von $\tilde{y}$, ..., x_m als Ergebnis liefert. Diese Funktion ersetzt x_1 in Gleichung (3) und in $u(x_1) = h_1(x_1)$, woraus schließlich $\tilde{u}(\tilde{y})$ anstelle von $u(y)$ folgt. In den meisten der Fälle, die in dieser Norm behandelt werden, ist in dieser Weise zu verfahren. Andernfalls kann $\tilde{u}(\tilde{y})$ aus einer Approximation durch Interpolation der Daten y_i und $u(y_i)$ aus mehreren Messungen gewonnen werden, siehe Gleichung (19) und Bild F.2.



Legende

- $\tilde{y}$ wahrer Wert der Messgröße Y
 $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ Varianz der Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(y|\tilde{y})$

Weitere Formelzeichen siehe Text.

Bild F.2 – Illustration der Funktion $\tilde{u}^2(\tilde{y})$ und der Interpolationsformel nach Gleichung (19)

F.2.4 Erkennungsgrenze und Nachweisgrenze

Auch ohne den mathematisch genauen Bezug auf die charakteristischen Grenzen nach Bayes herzustellen, die an anderer Stelle beschrieben sind (siehe Literaturhinweis [17]), können jetzt die charakteristischen Grenzen für eine nichtnegative Messgröße Y definiert werden. Y kann z. B. eine Konzentration eines Elementes oder die Aktivität eines Radionuklids in einer Probe sein. Der wahre Wert $\tilde{y}$ ist dann null, wenn das gesuchte Element oder Radionuklid nicht vorhanden ist.

Um die Erkennungsgrenze und die Nachweisgrenze bestimmen zu können, muss die Standardunsicherheit $\tilde{u}(\tilde{y})$ als Funktion des wahren Wertes $\tilde{y}$ der Messgröße berechnet werden. Wenn das nicht möglich ist, müssen Näherungen benutzt werden, wie es in 5.3.3 und 6.3 beschrieben ist.

Dann ist die Erkennungsgrenze y^* (siehe Bild F.3) die charakteristische Grenze, bei deren Überschreitung durch einen ermittelten Wert y gefolgert wird, dass das Element oder das Radionuklid in der Probe vorhanden ist. Wenn $y \leq y^*$ ist, wird entschieden, dass der wahre Wert null hinreichend wahrscheinlich ist, d. h. es wird entschieden, dass das Element oder das Radionuklid nicht in der Probe vorhanden ist. Wenn folgende Entscheidungsregel beobachtet wird

$$P(y > y^* | \tilde{y} = 0) = \int_{y^*}^{\infty} f(y | \tilde{y} = 0) dy = \alpha \quad (\text{F.10})$$

wird eine falsche Entscheidung mit der Wahrscheinlichkeit α getroffen.

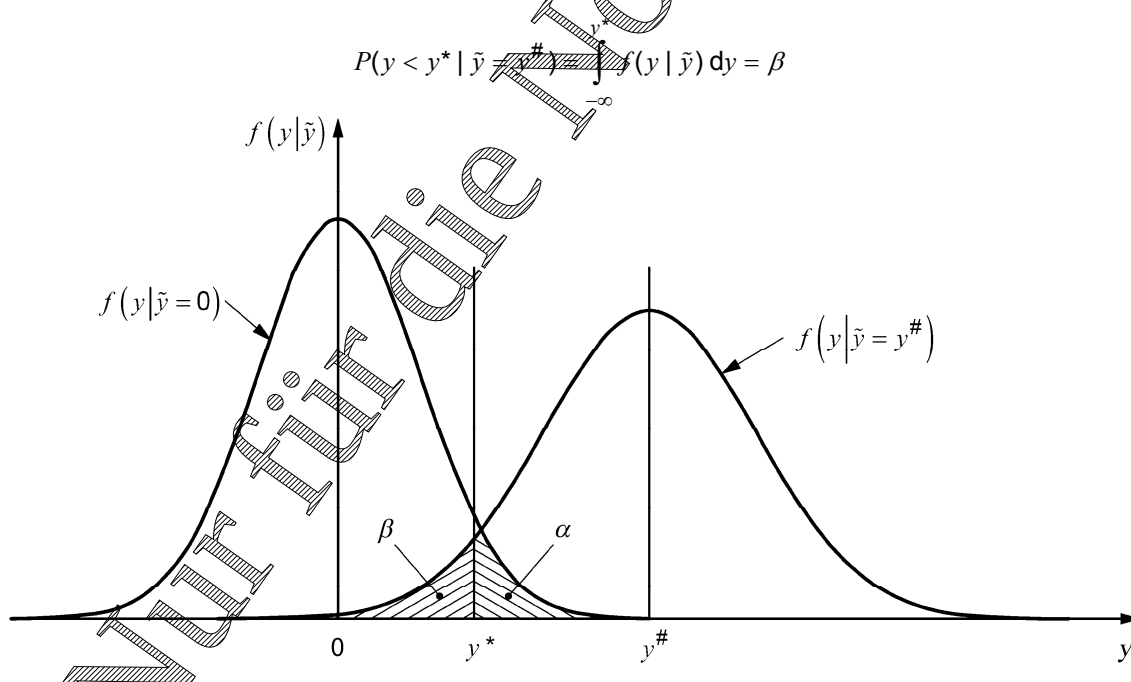
Die Erkennungsgrenze wird festgelegt durch

$$y^* = k_{1-\alpha} \cdot \tilde{u}(0) \quad (\text{F.11})$$

mit dem $(1 - \alpha)$ -Quantil $k_{1-\alpha}$ der standardisierten Normalverteilung. $\tilde{u}(0)$ ist die Unsicherheit der Messgröße, wenn ihr wahrer Wert $\tilde{y}$ gleich null ist.

Die Nachweisgrenze $y^\#$ (siehe Bild F.3) ist der kleinste wahre Wert der Messgröße, der mit dem anzuwendenden Messverfahren noch nachgewiesen werden kann. Die Entscheidungsregel wird festgelegt durch

$$P(y < y^* | \tilde{y} = y^\#) = \int_{-\infty}^{y^*} f(y | \tilde{y} = y^\#) dy = \beta \quad (\text{F.12})$$



Legende

y primäres Messergebnis der Messgröße Y

$f(y | \tilde{y})$ Wahrscheinlichkeitsverteilung; bedingte Wahrscheinlichkeit, einen Messwert y zu erhalten, wenn ein wahrer Wert $\tilde{y}$ der Messgröße Y vorliegt

Bild F.3 – Erkennungsgrenze y^* und Nachweisgrenze $y^\#$

Die Nachweisgrenze $y^\#$ wird hinreichend groß und größer als die Erkennungsgrenze y^* so festgelegt, dass die Wahrscheinlichkeit für die Fehlentscheidung $y < y^*$ höchstens gleich β ist.

Die Nachweisgrenze wird festgelegt durch

$$y^\# = y^* + k_{1-\beta} \cdot \tilde{u}(y^\#) \quad (\text{F.13})$$

mit dem $(1 - \beta)$ -Quantil $k_{1-\beta}$ der standardisierten Normalverteilung.

F.2.5 Vertrauensgrenzen und bester Schätzwert

Die Vertrauensgrenzen (siehe Bild F.4) werden so gesetzt, dass ein Messergebnis y , das die Erkennungsgrenze y^* übersteigt, anzeigt, dass der wahre Wert $\tilde{y}$ der Messgröße Y mit der Wahrscheinlichkeit $(1 - \gamma)$ innerhalb der Grenzen des Vertrauensintervalls liegt. Die untere und obere Grenze des Vertrauensintervalls, $y^\triangleleft$ bzw. $y^\triangleright$, werden als $(1 - \gamma/2)$ -Quantile der Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(\tilde{y}|y)$ des wahren Wertes festgelegt unter Berücksichtigung des vorliegenden primären Messergebnisses und mit der A-priori-Kenntnis, dass die Messgröße nichtnegativ ist. Die Grenzen werden so festgelegt, dass:

$$P(\tilde{y} < y^\triangleleft | y) = \int_0^{y^\triangleleft} f(\tilde{y}|y) d\tilde{y} = \gamma/2 \quad (\text{F.14})$$

$$P(\tilde{y} > y^\triangleright | y) = \int_{y^\triangleright}^{\infty} f(\tilde{y}|y) d\tilde{y} = \gamma/2 \quad (\text{F.15})$$

Daraus werden explizit die Gleichungen

$$y^\triangleleft = y - k_p u(y) \quad \text{mit} \quad p = \omega \cdot (1 - \gamma/2) \quad (\text{F.16})$$

$$y^\triangleright = y + k_q u(y) \quad \text{mit} \quad q = 1 - \omega \gamma/2 \quad (\text{F.17})$$

gebildet. Der Parameter ω ist gegeben durch

$$\omega = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{y/u(y)} \exp\left(-\frac{v^2}{2}\right) dv = \Phi[y/u(y)] \quad (\text{F.18})$$

Wenn ein physikalischer Effekt beobachtet wird, d. h. $y > y^*$, kann der beste Schätzwert $\hat{y}$ der Messgröße Y berechnet werden (Bild F.4). Der beste Schätzwert $\hat{y}$ ist der Erwartungswert der Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(\tilde{y}|y)$. Die Standardabweichung von $\tilde{y}$ ist die Standardunsicherheit $u(\hat{y})$, die dem besten Schätzwert $\hat{y}$ der Messgröße Y zugeordnet ist.

$$u^2(\hat{y}) = \text{Var}(\tilde{y}|y) \quad (\text{F.19})$$

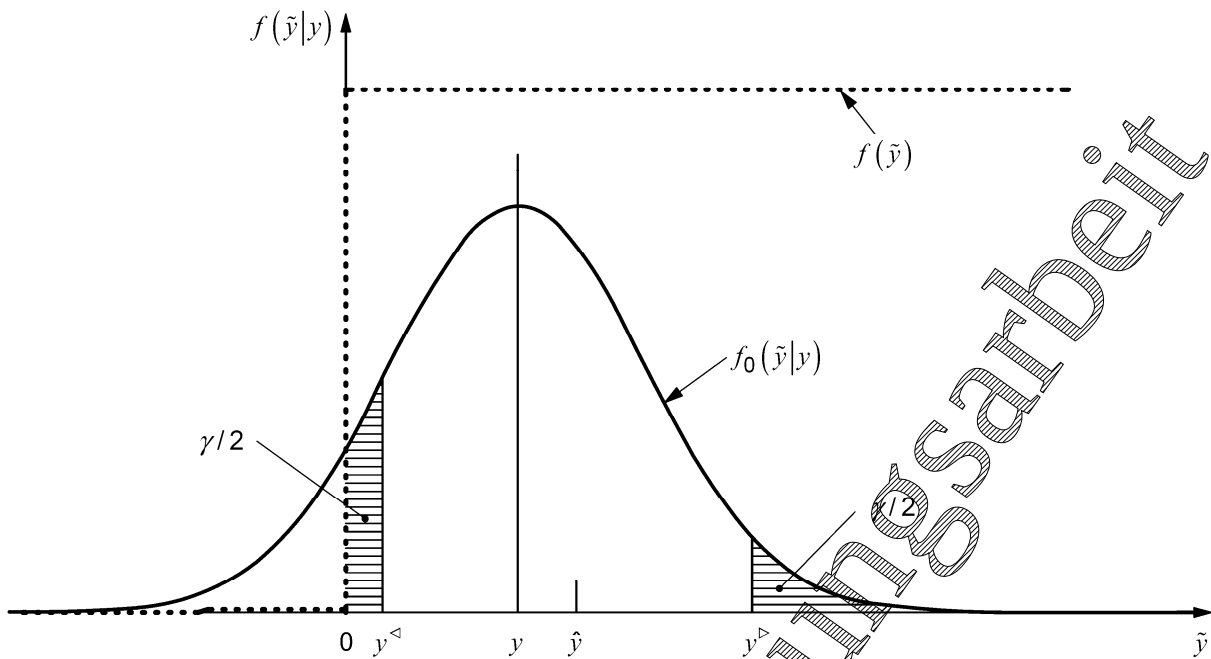
Mit ω nach Gleichung (F.18) wird der beste Schätzwert $\hat{y}$ berechnet aus (siehe Literaturhinweis [38])

$$\hat{y} = E(\tilde{y}|y) = y + \frac{u(y) \cdot \exp\left\{-y^2/[2 \cdot u^2(y)]\right\}}{\omega \sqrt{2\pi}} \quad (\text{F.20})$$

mit der zugeordneten Standardunsicherheit $u(\hat{y})$

$$u(\hat{y}) = \sqrt{u^2(y) - (\hat{y} - y) \cdot \hat{y}} \quad (\text{F.21})$$

Es gelten die folgenden Beziehungen: $\hat{y} > y$ und $\hat{y} > 0$ sowie $u(\hat{y}) \leq u(y)$. Für $y \gg u(y)$ sind die Näherungen $\hat{y} = y$ und $u(\hat{y}) = u(y)$ gültig.



Legende

$\tilde{y}$ wahrer Wert der Messgröße Y

$f(\tilde{y}|y)$ Wahrscheinlichkeitsverteilung für den wahren Wert $\tilde{y}$ der Messgröße Y , gegeben ein gemessener Schätzwert y

Weitere Kurven und Formelzeichen siehe Text^{N3)}.

Bild F.4 – Definition der Vertrauensgrenzen und des besten Schätzwertes

Die Vertrauensgrenzen werden als $(1 - \gamma/2)$ -Quantile der Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(\tilde{y}|y)$ des wahren Wertes berechnet bei gegebenem Messwert und mit der A-priori-Kenntnis, dass die Messgröße nichtnegativ ist. Der beste Schätzwert ist der Erwartungswert der Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(\tilde{y}|y)$.

F.2.6 Beurteilung eines Messverfahrens

Nachdem eine Messung durchgeführt wurde und die Auswertung der Messung nach ISO/IEC GUIDE 98-3 (siehe auch Literaturhinweise [1], [2]) erfolgt ist, kann das Messverfahren wie folgt beurteilt werden:

Das Messergebnis wird mit der Erkennungsgrenze nach Gleichung (F.11) verglichen. Wenn das Messergebnis y größer ist als die Erkennungsgrenze y^* , wird entschieden, dass der nichtnegative physikalische Effekt, der durch die Messgröße quantifiziert wird, vorliegt, d. h., das interessierende Element oder die betrachtete Aktivität ist in der Probe vorhanden.

Zur Prüfung, ob ein Messverfahren für den Nachweis des durch die Messgröße quantifizierten physikalischen Effektes geeignet ist oder nicht, muss die Nachweisgrenze mit einem vorgegebenen Richtwert verglichen werden. Ein Richtwert in dieser Norm basiert auf gestellten Anforderungen an ein anzuwendendes Messverfahren aus wissenschaftlichen, gesetzlichen oder anderen Gründen. Die Nachweisgrenze wird nach Gleichung (F.13) berechnet. Wenn die Nachweisgrenze kleiner ist als der Richtwert, ist das Messverfahren für den vorgesehenen Messzweck geeignet, sonst nicht.

^{N3)} Nationale Fußnote: Die Bezeichnung der horizontalen Achse wurde gegenüber dem ISO-Original korrigiert. Dort war sie fälschlicherweise mit y bezeichnet.

Literaturhinweise

- [1] DIN 1319-3:1996, Grundlagen der Messtechnik – Teil 3: Auswertung von Messungen einer einzelnen Messgröße – Messunsicherheit
- [2] DIN 1319-4:1999, Grundlagen der Messtechnik – Teil 4: Auswertung von Messungen – Messunsicherheit
- [3] Altshuler, B. and Pasternack, B.: 1963, Statistical Measures of the Lower Limit of Detection of a Radioactivity Counter. Health Physics 9; 293–298
- [4] Nicholson, W. L.: 1963, Fixed time estimation of counting rates with background corrections. (Hanford Laboratories, Richland)
- [5] Currie, L. A.: 1968, Limits for Qualitative Detection and Quantitative Determination. Anal. Chem. 40; 586–593
- [6] Weise, K., Wöger, W.: 1999, Messunsicherheit und Messdatenauswertung. (Wiley-VCH, Weinheim)
- [7] Weise, K., Wöger, W.: 1992, Eine Bayessche Theorie der Messunsicherheit. PTB-Bericht N-11. (Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig)
- [8] Berger, J. O.: 1985, Statistical Decision Theory and Bayesian Analysis. (Springer, New York)
- [9] Bernardo, J. M. und Smith, A. F. M.: 1994, Bayesian Theory. (Wiley, Chichester, UK)
- [10] Bernardo, J. M.: 2003, Bayesian Statistics, in: Probability and Statistics (R. Viertl, ed) of the Encyclopedia of Life Support Systems (EOLSS). (UNESCO, Oxford, UK)
- [11] Gelman, A., Carlin, J. B., Stern, H. und Rubin, D. B.: 2003, Bayesian Data Analysis (2nd edition). (Chapman, London)
- [12] Gregory, P. C.: 2005, Bayesian logical data analysis for the physical sciences. (Cambridge University Press, Cambridge)
- [13] Jaynes, E. T.: 2003, Probability Theory – The Logic of Science, edited by G.L. Bretthorst. (Cambridge University Press, Cambridge)
- [14] Lee, P. M.: 1989, Bayesian Statistics: An Introduction. (Oxford University Press, New York)
- [15] Robert, Ch. P.: 2001, The Bayesian Choice (2nd. ed.). (Springer, New York)
- [16] Weise, K., Wöger, W.: 1993, A Bayesian theory of measurement uncertainty. Meas. Sci. Technol. 4; 1–11
- [17] Weise, K.: 1998, Bayesian-statistical decision threshold, detection limit and confidence interval in nuclear radiation measurement. Kerntechnik 63; 214–224
- [18] Weise, K., Hübel, K., Michel, R., Rose, E., Schläger, M., Schrammel, D., Täschner, M.: 2005, Determination of the detection limit and decision threshold for ionizing-radiation measurements: Fundamentals and particular applications; Proposal for a standard. Report FS-05-129-AKSIGMA, Fachverband für Strahlenschutz (TÜV-Verlag, Cologne)
- [19] Weise, K., Hübel, K., Rose, E., Schläger, M., Schrammel, D., Täschner, M., Michel, R.: 2006, Bayesian decision threshold, detection limit and confidence limits in ionizing-radiation measurement, Radiat. Prot. Dosimetry 121(1), 52–63
- [20] DIN 25482-11:2003, Nachweisgrenze und Erkennungsgrenze bei Kernstrahlungsmessungen – Teil 11: Messungen mit Albedodosimetern
- [21] ISO 18589, Measurement of radioactivity in the environment – Soil – (in preparation)

- [22] ISO 9696 Water quality – Measurement of gross alpha activity in non-saline water – Thick source method (in preparation)
- [23] ISO 9697, Water quality – Measurement of gross beta activity in non-saline water (in preparation)
- [24] ISO 9698, Water quality – Determination of tritium activity concentration – Liquid scintillation counting method (in preparation)
- [25] ISO 9699 Water quality – Measurement of gross alpha and beta activity concentration in non-saline water – Liquid scintillation counting method (in preparation)
- [26] ISO 10703, Water quality – Determination of the activity concentration of radionuclides – Method by high resolution gamma-ray spectrometry (in preparation)
- [27] ISO 7503, Measurement of radioactivity – Evaluation of surface contamination (in preparation)
- [28] ISO 28218, Performance criteria for Radiobioassay (in preparation)
- [29] Abramowitz, M., Stegun, I.: 1968, Handbook of Mathematical Functions, 5th ed., Chap. 26. (Dover Publications, New York)
- [30] Weise, K.: 2004, The Bayesian count rate probability distribution in measurement of ionizing radiation by use of a ratemeter. PTB Report Ra-44. (Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig)
- [31] Weise, K., Michel, R.: 1995, Erkennungsgrenze, Nachweisgrenze und Vertrauensbereich in der allgemeinen Kernstrahlungs-Spektrometrie. Kerntechnik 60; 189–196
- [32] Weise, K., Wöger, W.: 2000, Removing model and data non-conformity in measurement evaluation, Meas. Sci. Technol. 11; 1649–1658.
- [33] Weise, K. 1995, Mathematical foundation of an analytical approach to Bayesian-statistical Monte Carlo spectrum unfolding, PTB-Bericht N-24. (Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig)
- [34] Mende, O., Michel, R., Kirchhoff, K., Weise, K.: 1994, Untersuchungen zur Festlegung von Erkennungs- und Nachweisgrenzen sowie Vertrauensbereichen bei alphaspektrometrischen Kernstrahlungsmessungen. In: Koelzer, W., Maushart, R. (eds): Strahlenschutz: Physik und Meßtechnik. 26. Jahrestagung des Fachverbandes für Strahlenschutz e.V., Karlsruhe, 24.–26. May 1994, Vol. 1, 254–259 (TÜV-Verlag, Cologne)
- [35] Westmeier, W.: 1984, Computerized analysis of alpha-particle spectra. Int. J. Appl. Radiat. Isot., 35, 263
- [36] Westmeier, W.: 1986, The fitting of solid state detector spectra. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A242, 437
- [37] Bortels, G., Collaers, P.: 1987, Analytical function for fitting peaks in alpha-particle spectra from Si-detectors. Int. J. Appl. Rad. Isot., 38; 831
- [38] Little, R. J. A.: 1982, The statistical analysis of low-level radioactivity in the presence of background counts. Health Phys. 43; 693–703
- [39] Miller, G., Martz, H. F., Little, T. T., Guimette, R.: 2002, Using exact Poisson likelihood functions in Bayesian interpretation of counting measurements. Health Phys. 83; 512–518