

---

**Forschungszentrum Karlsruhe**  
Technik und Umwelt

---

**Wissenschaftliche Berichte**  
FZKA 5699

**Statistische Material-  
bilanzierungsverfahren  
zur on-line Meßinstrument-  
überwachung**

**R. Seifert**

Institut für Angewandte Informatik

Februar 1996

---



**Forschungszentrum Karlsruhe**

**Technik und Umwelt**

**Wissenschaftliche Berichte**

**FZKA 5699**

**Statistische Materialbilanzierungsverfahren  
zur on-line Meßinstrumentüberwachung**

**R. Seifert**

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

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe**

**1996**

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

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

**ISSN 0947-8620**

## **Zusammenfassung**

In dieser Arbeit wird das Prinzip der Anwendung Statistischer Bilanzierungsverfahren zur on-line Überwachung der Zuverlässigkeit von Meßinstrumenten vorgestellt. Die ursprünglich zur Materialüberwachung entwickelten Bilanzierungsverfahren werden erstmals zur Meßinstrumentüberwachung eingesetzt. Ein konkretes Anwendungsbeispiel demonstriert die Einsetzbarkeit der Verfahren für diese Aufgabe. Eine Simulationsstudie belegt die Sensitivität der Verfahren.

## **Statistical Methods of Material Balancing for On-line Control of Measurement Instruments**

### **Abstract:**

In this report the principles of applying statistical methods of material balancing for the on-line control of the reliability of measurement instruments is introduced. A real example demonstrates the applicability of these methods originally developed for safeguards applications in this area. An additional investigation based on Monte-Carlo simulations proves the performance of these methods.

## Einleitung, Problemstellung

Moderne technische Anlagen sind ohne aufwendige Meßinstrumentierung nicht mehr vorstellbar. Diese Meßstellen stellen Meßwerte zur Verfügung, die Informationen über den Prozeß liefern. So zum Beispiel, ob Prozeßparameter eingehalten werden oder ob das Prozeßprodukt innerhalb seiner Spezifikationen liegt. Daneben dienen die Meßdaten zur Regelung und Steuerung des Prozesses. Meßdaten können darüberhinaus zur Verifikation von analytischen Modellen des Prozesses dienen oder der stochastischen Prozeßmodellierung das notwendige Datenmaterial zur Verfügung stellen, wie das zum Beispiel bei der Versuchsmethodik der Fall ist, bei der aus den Meßdaten heraus die relevanten Einflußgrößen und der optimale Arbeitspunkt bestimmt werden.

Die Bedeutung der Meßwerterfassung wird also deutlich zum einen aus der aufwendigen Meßinstrumentalisierung technischer Anlagen, zum anderen aus der Vielzahl der Anwendungsfelder für die Meßdaten.

Zumindest implizit wird bei der Meßdatenerfassung meist die Annahme gemacht, daß die Meßwerte den wahren, den tatsächlichen Werten entsprechen. Diese Annahme muß jedoch dahingehend eingeschränkt werden, daß die Meßwerte nur die wahren Werte repräsentieren. Jede Messung ist nämlich mit einer gewissen Meßunsicherheit behaftet, dem sogenannten Meßfehler. Diese Abweichungen vom wahren Wert kann man wahrscheinlichkeits-theoretisch ausdrücken. Jede Messung wird als Realisierung einer Zufallsvariablen aufgefaßt. Ein Maß für die Streuung um den wahren Wert ist die Varianz, welche definitionsgemäß das Quadrat der Standardabweichung der Zufallsvariablen ist. Für jedes Meßinstrument muß also außer dem Meßbereich auch ein Vertrauensintervall angegeben werden, in dem die Meßfehler mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit liegen, um ein Maß für die Zuverlässigkeit der Meßwerte zu erhalten.

Die Meßfehlercharakteristik eines Meßinstruments kann sich jedoch auch im Prozeßbetrieb verändern. So kann ein Meßinstrument wegdriften, das heißt nicht mehr um den wahren Wert streuen, oder es kann stärker, das heißt mit größerer Varianz, um den wahren Wert streuen. Wenn man die Wichtigkeit der Meßwerte bedenkt, ist klar, daß die Überwachung der Zuverlässigkeit der verwendeten Meßinstrumente von großer Bedeutung ist und die Meßinstrumente laufend überprüft werden müssen. Diese Überprüfung der Meßinstrumente kann durch Meßkontrollprogramme erfolgen, die aber sehr aufwendig sind. Sie können in aller Regel auch nicht im on-line Betrieb durchgeführt werden, sondern setzen ein Abschalten des Prozesses voraus. Die Intervalle für die Kalibrierung der Meßinstrumente wird von der Wichtigkeit und der Sensibilität der erfaßten Meßdaten abhängen. Je zuverlässiger der Meßwert sein muß, desto häufiger muß das Meßinstrument überprüft werden. Insgesamt kann aber die These aufgestellt werden, daß die Überprüfung immer zum falschen Zeitpunkt erfolgt. Stellt sich nämlich heraus, daß das Gerät noch den Spezifikationen entspricht, so war die Überprüfung zu diesem Zeitpunkt eigentlich überflüssig. Entspricht das Gerät hingegen nicht mehr den Spezifikationen, so kam die Überprüfung zu spät. Das in dieser Arbeit vorgestellte Statistische Bilanzierungsverfahren zur Meßinstrumentüberwachung kann hingegen im laufenden Betrieb eingesetzt werden. Es erlaubt also eine on-line Überwachung und kann so Abweichungen vom spezifizierten Zustand frühzeitig erkennen.

Bilanzierungsverfahren zur Meßinstrumentüberwachung können überall dort eingesetzt werden, wo einzelne oder mehrere Prozeßkomponenten zu Materialbilanzonen zusammengefaßt werden können. Dazu muß alles Material, das diese Bilanzzone betritt und verläßt, sowie das Inventar, das sich innerhalb der Bilanzzone befindet, gemessen werden können. Wird zum Beispiel der Zugang eines Materials zu einer Prozeßkomponente mittels eines Meßinstruments A gemessen, der Ausgang dieses Materials aus der Prozeßkomponente mit Meßinstrument B, und

das Materialinventar in der Prozeßkomponente mit Meßinstrument C, so stellt diese Prozeßkomponente eine Materialbilanzzone dar, in der die Zuverlässigkeit der drei Meßinstrumente A, B und C on-line mit Materialbilanzierungsverfahren überwacht werden kann.

### **Prinzip der Materialbilanzierung**

Um Materialbilanzierungsverfahren anwenden zu können, legt man zunächst den Untersuchungszeitraum, die sog. Referenzzeit, fest. Im Dauerbetrieb schließt sich dann Referenzzeit an Referenzzeit. Dann wird die Referenzzeit in mehrere Bilanzierungsperioden unterteilt, in denen jeweils die Bilanzen geschlossen werden. Man erhält somit eine zeitliche Folge von Bilanzergebnissen. Da jedes dieser Bilanzergebnisse sich aus einer Vielzahl von Einzelmessungen zusammensetzt, die alle mit unvermeidlichen Meßfehlern behaftet sind, werden die Bilanzergebnisse auch dann, "wenn die Bilanz aufgeht", im allgemeinen nicht Null sein, sondern um die Nulllinie streuen. Jede Einzelmessung wird als Realisierung einer Zufallsvariable aufgefaßt, deren Standardabweichung als bekannt vorausgesetzt wird. Damit repräsentieren die Bilanzergebnisse selbst wieder Zufallsvariable. Mit den Regeln der Fehlerfortpflanzung (propagation of variances) kann nun die Varianz-Kovarianzmatrix oder Dispersionsmatrix der Folge der Bilanzergebnisse berechnet werden. Diese Varianz/Kovarianzmatrix repräsentiert das statistische Meßmodell. Mit Hilfe eines statistischen Hypothesentests kann nun entschieden werden, ob die Bilanz aufgeht, oder ob die Streuung der Bilanzergebnisse zu groß ist und nicht mehr durch das zugrundegelegte Meßmodell erklärt werden kann.

Für dieses Hypothesentestproblem gibt es eine Vielzahl sogenannter Signifikanztests. Man kann auch zeigen, daß es keinen besten Test gibt. So wurden zahlreiche Testverfahren aus der Literatur mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationsstudien auf

ihre Güte getestet /1,2/. Diese Untersuchungen führten auch zur Entwicklung eines neuen Testverfahrens GEMUF-Test /3/, das sich insbesondere durch seine Robustheit auszeichnet. Zudem läßt sich dieser Test auch theoretisch begründen.

Materialbilanzierungsverfahren wurden ursprünglich zur Materialüberwachung (safeguards) entwickelt, wo sie schon seit langem eine wichtige Rolle spielen. In dieser Eigenschaft können sie überall dort lohnend eingesetzt werden, wo mit gefährlichen, wertvollen oder mit sonstigen besonderen Eigenschaften behafteten Material umgegangen wird. Zukünftige Einsatzmöglichkeiten sind insbesondere in der Umweltüberwachung zu sehen.

Schon früh wurde erkannt, daß diese Verfahren auch zum Test von Meßmodellen einsetzbar sind /4/. Diese Erkenntnis war rein theoretischer Natur und basierte auf simulierten Daten. Diese Ergebnisse wurden in dann praktischen Anwendungen bestätigt.

Neu in dieser Arbeit ist also nicht die Entwicklung von Bilanzierungsmethoden, sondern die Idee, diese Verfahren konsequent zur Überwachung der Zuverlässigkeit der verwendeten Meßinstrumente einzusetzen.

### **Software-Entwicklung**

Wegen der Komplexität der Berechnungen kann weder die Erstellung des Meßmodells noch die Auswertung der Bilanzdaten mittels Signifikanztests von Hand durchgeführt werden. Deshalb wurden im Forschungszentrum Karlsruhe Software-Tools für diese Aufgaben entwickelt.

Zum einen wurde das Computerprogramm MEMO (Programm zur Berechnung des Meßmodells) /5,6/ realisiert, das die Varianz/Kovarianzmatrix der auszuwertenden Folge von Bilanzdaten berechnet.

Zum anderen wurde das Programm PROSA (Programm zur statistischen Auswertung von sequentiellen Bilanzdaten) /7,8/ entwickelt. In PROSA sind zwei Signifikanztests enthalten:

der Page's Test /9/  
und der oben erwähnte GEMUF-Test.

PROSA simuliert in einem ersten Schritt die sequentiellen Testschranken der Tests, berechnet dann die jeweiligen Teststatistiken und vergleicht diese dann mit den Testschranken. Die Ausgabe von PROSA kann sowohl in numerischer Form als auch in graphischer Form erfolgen.

Zur on-line Anwendung im Rahmen der Meßinstrumentüberwachung wurden diese beiden Module zum Programmpaket MESA zusammengebunden /10/.

Eingabedatensätze von MESA sind zum einen die Meßfehlercharakteristiken der eingesetzten Meßinstrumente und zum anderen die aktuellen Meßergebnisse. Bei den Meßfehlercharakteristiken kann MESA sowohl zufällige wie systematische Fehlerkomponenten verarbeiten. Zudem akzeptiert MESA additive wie multiplikative Fehlerkomponenten. Die Mengenbestimmung kann über ein Produkt zweier Einzelmessungen erfolgen (z.B. Volumenmessung und Konzentrationsmessung). Kompliziertere Mengenbestimmungen müssen über ein Vorprogramm aufgearbeitet werden.

Im Echtzeitmodus liefert MESA dann Ergebnisse, die Aufschluß darüber geben, ob die Bilanzen aufgehen oder nicht, was auf eine Änderung in der Meßfehlercharakteristik der Meßinstrumentierung schließen läßt.

### **Praktische Erfahrungen**

Erstmals praktisch eingesetzt wurden Bilanzierungsverfahren zur Meßinstrumentüberwachung in der Test-Müllverbrennungsanlage TAMARA /11/ im Forschungszentrum Karlsruhe. In der

Rauchgasreinigungsstrecke dieser Anlage wird in einer Komponente, dem sog. 1. Wäscher, HCl aus dem Rauchgas ausgewaschen. Die Menge HCl, die im Rauchgas ankommt, wird bestimmt aus einem Produkt einer Durchflußmessung und einer Leitfähigkeitsmessung. Die Menge HCl in der Prozeßkomponente wird ermittelt aus einem Produkt von Volumenbestimmung und einer weiteren Leitfähigkeitsbestimmung. Ausgänge aus der Materialbilanzzone sind die Absalzmenge und die im Reingasstrom verbleibende HCl-Menge, die beide wiederum als Produkt von Volumen- und Konzentrationsmessungen ermittelt werden. Die Meßdaten dienen erstens dazu, den Prozeßablauf zu überprüfen, zweitens zur Steuerung des Prozesses und drittens zur Verifikation analytischer Modelle über den Prozeßablauf. Nachdem in Gesprächen mit den Betreibern der Anlage die Meßfehlercharakteristiken der Meßinstrumente und ihre gegenseitigen Korrelationen ermittelt wurden, konnte das statistische Meßmodell erstellt werden und die sequentiellen Bilanzen auf der Grundlage dieses Meßmodells ausgewertet werden. Es stellte sich jedoch heraus, daß die Bilanzen nicht aufgingen. Nachfolgeuntersuchungen zeigten, daß ein zur Konzentrationsbestimmung eingesetztes pH-Leitfähigkeits-Meßinstrument nicht seinen Spezifikationen entsprach. Dieses Erkenntnis erklärte auch nachträglich, weshalb bei der Verifikation des analytischen Prozeßmodells Schwierigkeiten auftraten.

Nachdem dieses Instrument ersetzt worden war, konnten die Schwankungen der Bilanzergebnisse durch das zugrundegelegte Meßmodell erklärt werden. Gelegentlich auftretende Anomalien konnten durch nicht modellierte Eingriffe von außen erklärt werden. Diese Erfahrungen zeigen, daß die Bilanzierungsverfahren in der Praxis zur Meßinstrumentüberwachung geeignet sind. Sowohl ein Meßinstrument, das nicht seinen Spezifikationen entsprach, als auch nicht modellierte Eingriffe in das Bilanzierungssystem wurden erkannt.

## Simulationsergebnisse

Wie die praktische Anwendung gezeigt hat, können die Bilanzierungsverfahren Änderungen in der Meßfehlercharakteristik erkennen. Dieses Beispiel gibt jedoch keinen Hinweis darauf, wie "sensibel" die Verfahren sind. Deshalb wurde ein Programm MOCASIN (Monte-Carlo Simulation) entwickelt, das mit Hilfe von Monte-Carlo Simulationen diese Frage beantwortet.

Als Modellanlage soll eine Komponente dienen, in der sich das Inventar befindet. Ferner soll es einen Eingang und einen Ausgang geben. Die Materialmenge soll jeweils direkt gemessen werden. Sowohl Eingangsmessung wie Ausgangsmessung sollen einen zufälligen Fehler von 1% (multiplikativer Fehler) haben, ebenso die Inventarmessung. Die Anlage soll sich im steady-state befinden. Als Normvorgabe soll der Zugang und der Abgang pro Periode eine Materialmenge von 100g sein. Die Menge an Inventar soll 500g betragen. Als Referenzzeit wurden zehn Bilanzierungsperioden gewählt.

Damit läßt das Statistische Meßmodell der Anlage errechnen, das heißt die Varianz/Kovarianzmatrix der zeitlichen Folge der Bilanzergebnisse.

Als nächstes wurde angenommen, daß sich die tatsächliche Meßungenauigkeit der Inventarbestimmung 2% beträgt und nicht wie in der Spezifikation vorgesehen 1%. Mit Hilfe des Programms MOCASIN wurden Bilanzergebnisse gemäß des tatsächlichen Meßmodells simuliert und auf der Basis des ursprünglichen Meßmodells ausgewertet. Die Auswertung erfolgte auf dem 5%-Niveau, das heißt am Ende der Referenzzeit ist mit einer Fehlalarmrate von 5% zu rechnen.

Abbildung 1 zeigt die Ergebnisse eines der beiden in MESA eingebundenen Testverfahrens, des GEMUF-Tests. Dabei sind über den Bilanzierungsperioden der Verlauf der (kumulierten) Fehlalarmrate und der (kumulierten) Entdeckungswahrscheinlichkeiten aufgetragen. Man sieht, daß der GEMUF-Test diese Abweichung von der Spezifikation bereits nach drei Bilanzierungsperioden mit fast 50% Wahrscheinlichkeit, am

Ende der Referenzzeit mit 90% Wahrscheinlichkeit entdeckt hat.

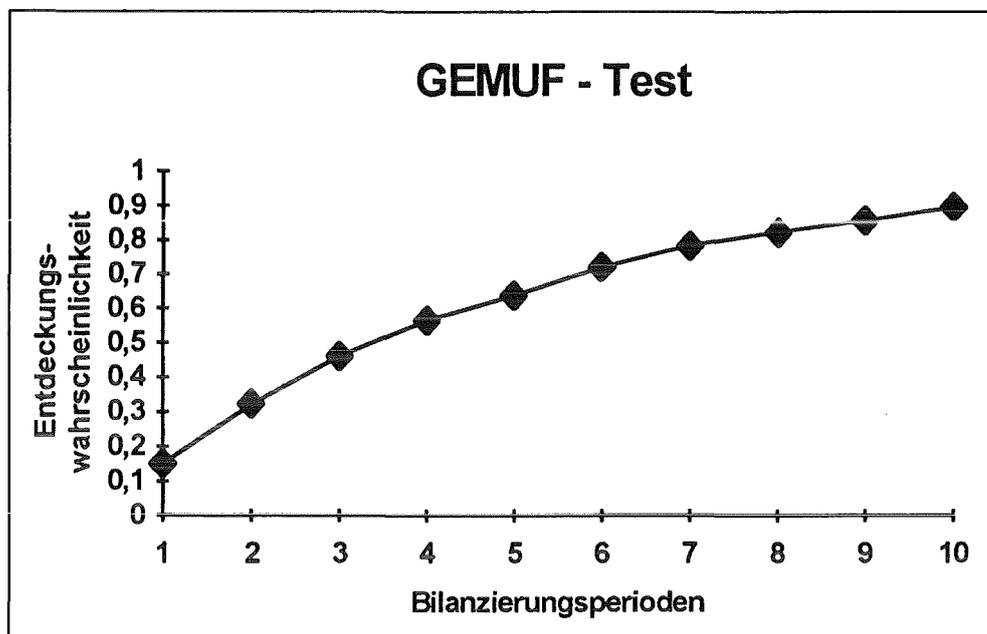


Abbildung 1: Zeitlicher Verlauf der Entdeckungswahrscheinlichkeiten

In einer zweiten Simulationsstudie wurde angenommen, daß sich die Genauigkeit der Inventarbestimmung langsam aber stetig verschlechtert. Beträgt sie zu Beginn der 1. Periode noch 1% (wie spezifiziert), so verschlechtert sie sich von Inventur zu Inventur um 0,1%, bis sie am Ende der Referenzzeit auf 2% angewachsen ist. Wieder wurde das tatsächliche Statistische Meßmodell errechnet, gemäß diesem eine zeitliche Folge von Bilanzergebnissen simuliert und diese auf der Basis des ursprünglich zugrundegelegten Meßmodells ausgewertet.

Abbildung 2 zeigt wiederum die Ergebnisse des GEMUF-Tests, aufgetragen über dem Zeitverlauf. Deutlich sieht man, wie die Entdeckungswahrscheinlichkeiten zu Beginn erst langsam steigen, da hier die Abweichung von der Spezifikation noch gering ist. Gegen Ende der Referenzzeit steigt dann der Verlauf der Entdeckungswahrscheinlichkeiten stärker an. Nach

zehn Bilanzperioden wäre in diesem Fall das langsame Abweichen von der Spezifikation mit rund 50% Wahrscheinlichkeit entdeckt worden.

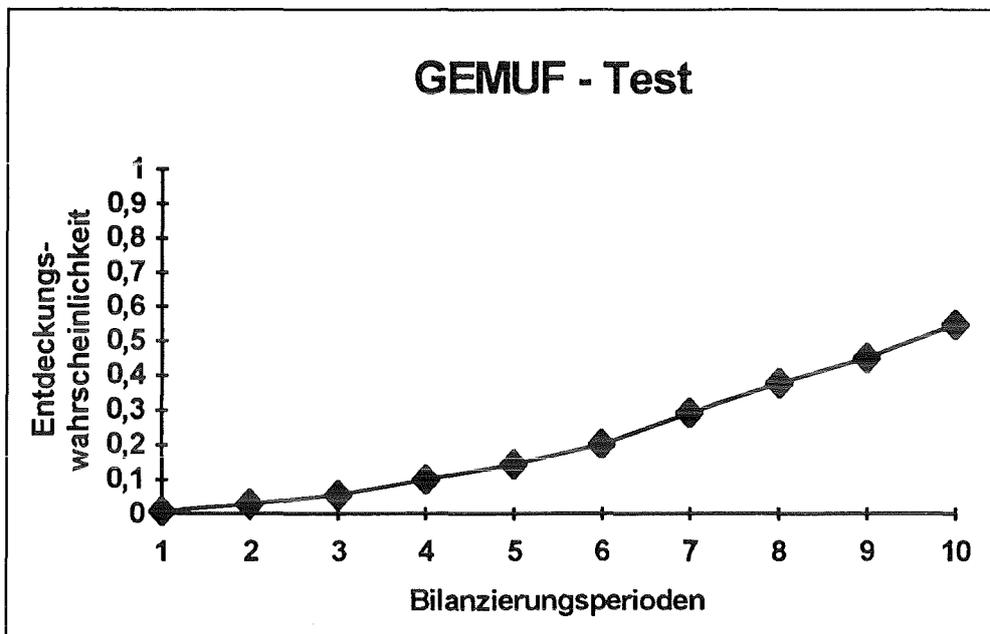


Abbildung 2: Zeitlicher Verlauf der Entdeckungswahrscheinlichkeiten

Mit MESA wurde des weiteren ein simulierter Verlauf der Bilanzergebnisse im Falle der langsamen Spezifikationsänderung ausgewertet. Abbildung 3 zeigt über dem zeitlichen Verlauf sowohl die Testschranken (Rauten) als auch der Teststatistik (Quadrate) des GEMUF-Tests, wie sie sich aus den simulierten Bilanzergebnissen ergaben. Im Verlauf der ersten sieben Bilanzierungsperioden blieb die Statistik knapp unter der Testschranke, aber mit dem Überschreiten der Schranke in der achten Periode konnte in diesem Simulationslauf die (schleichende) Abweichung von der Spezifikation entdeckt werden.

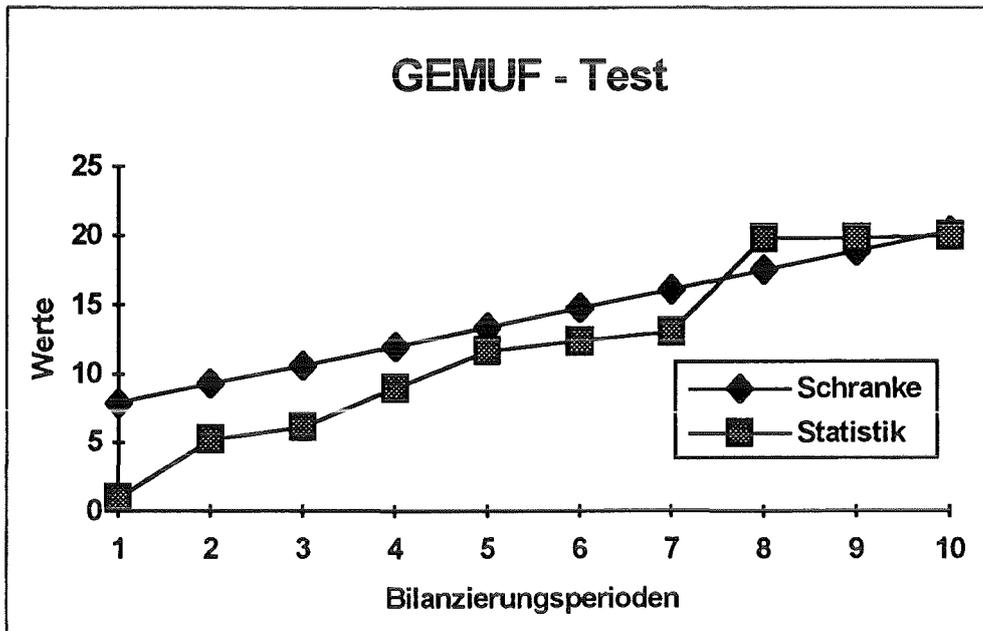


Abbildung 3: Zeitlicher Verlauf von Schranke und Statistik des GEMUF - Tests bei einem simulierten Lauf

### Schlußbemerkungen

Moderne technische Anlagen sind ohne aufwendige Meßinstrumentierung nicht mehr vorstellbar. Zur Gewährleistung der Zuverlässigkeit müssen die verwendeten Meßinstrumente kontinuierlich überwacht werden. Dazu eignen sich statistische Bilanzierungsverfahren, wenn immer eine Gruppe von Meßinstrumenten zur einer Bilanzierungszone zusammengefaßt werden können. Falls dies nicht möglich ist, scheint der Einbau eines weiteren Meßinstrumentes oftmals lohnend, wenn man dadurch eine kontinuierliche Meßinstrumentüberwachung erreicht. Dies gilt insbesondere dann, wenn man bedenkt, daß die Alternative, aufwendige Meßkontrollprogramme mit Abschalten der Anlage oder Anlagenteilen, sicher kostenintensiver ist. Das im Forschungszentrum Karlsruhe entwickelte Programm MESA ist ein Werkzeug, diese Meßinstrumentüberwachung on-line durchzuführen. Zudem kann mit Hilfe des ebenfalls im Forschungszentrum Karlsruhe ent-

wickelten Programms MOCASIN überprüft werden, wie sicher, d.h. mit welcher Wahrscheinlichkeit, eine Änderung der Spezifikationen der Meßinstrumente in einer konkreten Anlage entdeckt werden kann.

## Literatur

- /1/ R. Avenhaus, R. Beedgen, D. Sellinschegg: " Test Procedures to Detect a Loss of Material in a Sequence of Balance Periods", KfK-Bericht 3935, Juni 1985
- /2/ R. Seifert: "GEMUF-Test und Fragen zur Near-Real-Time-Accountancy", KfK-Bericht 4326, November 1987
- /3/ R. Seifert: "The GEMUF Test - A New Sequential Test Procedure for Detecting a Loss of Material in a Sequence of Accounting Periods", Proceedings of the IAEA International Symposium on Recent Advances in Nuclear Material Safeguards, Vienna, November 10-14, 1986, Vol.1, p.377-384
- /4/ R. Beedgen, R. Seifert: "Statistical Methods for Verification of Measurement Models", ESARDA Bulletin, No. 15, November 1988
- /5/ U. Bicking, W. Golly, R. Seifert: "MEMO Version 2.0 Manual", KfK Report, KfK 5077, August 1992
- /6/ U. Bicking, W. Golly, R. Seifert: "MEMO - A PC Program to Establish Measurement Models for NRTA Evaluation Procedures", Journal of Nuclear Materials Management, 20(1992), Nr.3, S.30-33
- /7/ U. Bicking, W. Golly, N. Peter, R. Seifert: "PROSA VERSION 4.0 - Manual", KfK 4866, 1991
- /8/ U. Bicking, W. Golly, R. Seifert: "Real Sequential Evaluation of Materials Balance Data with the Computer Program PROSA", Proceedings of the RECOD '91, Sendai, Japan, April 14-18, 1991, p.516-523
- /9/ E.S. Page: "Continuous Inspection Schemes", Biometrika 41, 1954, p. 100-115
- /10/ U. Bicking, R. Seifert: "Das Computerprogramm MESA zur on-line Meßinstrumentüberwachung", FZKA-Bericht, in Vorbereitung
- /11/ A. Merz, H. Vogg: "TAMARA-ein Forschungsinstrument des Kernforschungszentrums Karlsruhe zur Abfallverbrennung", Abfallwirtschaftsjournal 1, 1989, 11