

Aufgabenstellung - Statistisches Consulting

Thema

Entwicklung eines statistischen Modells zur Automatisierung der Qualitätssicherung atmosphärischer Treibhausgasmessungen im Rahmen der Klimaüberwachung.
(Umweltforschungsstation Schneefernerhaus)

Ausgangssituation

Die klimarelevanten Messgrößen der Erde werden mit dem weltweiten Global Climate Observation System (GCOS) der WMO/UNO überwacht. Mit dessen Teilprogramm Global Atmosphere Watch, kurz GAW, werden die essentiellen klimarelevanten Messgrößen für die Erdatmosphäre gemessen. Die Kernaufgabe von GAW besteht darin, mit Messdaten zum chemischen und physikalischen Zustand der Erdatmosphäre eine weltweite Datenbasis hoch präziser und quantitativ vergleichbarer Daten zu bilden. Praktische Ziele sind beispielsweise die Verwendung der Daten für präzisere Klimamodelle, zur atmosphärischen Grundlagenforschung und zur Bewertung umweltpolitischer Maßnahmen für den Klimaschutz. Die Datenqualität soll dem aktuellen Stand der Wissenschaft genügen und die GAW Datenqualitätsziele (DQOs) sollen eingehalten werden.

Beschreibung des Problems

Die rechnerisch korrekte und zeitgerechte Durchführung der Qualitätssicherung der Klimagasmessungen an einer GAW Messstation ist ein vielschichtiger Prozess, der mehrere Prüf- und Kalibrierzyklen beinhaltet, die regelmäßig zu wiederholen sind und sich gegenseitig beeinflussen können.

Hierarchie der Standards Die Messstandards, bestehend aus Gasmischungen in Druckflaschen sind hierarchisch organisiert. Oben stehen mehrere Referenzstandards, die als zertifizierte Kopie die international gültige Standardreferenzskala repräsentieren. An diesen Referenzstandards müssen die Konzentrationswerte der für die Messung zu verwendenden Arbeitsstandards und Targets mittels multipler Vergleichsmessungen an die aktuell gültige Referenzskala „angebunden“ werden.

Kontinuierliche Überwachung der Messungen und Kalibrationen Mit den Arbeitsstandards werden die Messwerte der atmosphärischen Luft angebunden an die Standardreferenzskala. Die Targets dienen zur Überwachung der Langzeitstabilität der Arbeitsstandards und der zeitlichen Konsistenz der gesamten Zeitreihe. Es gilt mehrere Arbeitsstandards und Targets zu betreuen, die bei Bedarf auch an unterschiedlichen Geräten einzusetzen sind.

Nachführen von Arbeitsstandards und Targets Da nicht vollständig auszuschließen ist, dass die Konzentrationen in einer Flasche driften, müssen die zugeordneten Werte nach bestimmten Zeitabständen regelmäßig mit Vergleichsmessungen nachgeprüft und bei Bedarf korrigiert werden.

Berücksichtigen von Skalenänderungen Die gültigen Referenzskalen bei Klimagasen in den zentralen Kalibrierlaboren von GAW bestehen aus einer Menge an Druckbehältern mit Gasmischungen. Wegen des Verbrauchs dieser Gase bei Vergleichsmessungen muss aus praktischen Gründen von Zeit zu Zeit eine Neubefüllung und oder ein Austausch der Behälter durchgeführt werden. Bei signifikanten Änderungen der gesamten Skala werden dann neue Versionen der international gültigen Referenzskala offiziell benannt und publiziert. Auch während der Betriebsdauer eines einzelnen Standards treten an den in der

Datenbank abgespeicherten Werten kleinere Änderungen auf, die vor internationalen Ringversuchen berücksichtigt werden. (Die Richtlinien von GAW erfordern, dass anschließend an den Messstationen alle Messwerte auf Basis der neuen Skala bis an den Beginn der Messreihe rückgerechnet, korrigiert und an die Welt Datenzentren neu geliefert werden. Da diese Änderungen je nach Messzylinder individuell ausfallen, müssen die neuen individuellen Konzentrationswerte über eine Datenbank abgefragt, und jede einzelne Anbindung, deren Regressionsdaten gespeichert wurden, mit den neuen individuellen Konzentrationswerten aktualisiert und neu gerechnet werden. Erst damit kann dann die Konzentration des Arbeitsstandards korrekt nachbestimmt werden. Somit können schließlich die Messwerte auf die neue Skala zurückgeführt werden.)

Nachführen linearer oder nichtlinearer Eichfunktionen Verwendete Detektoren können eine nichtlineare Empfindlichkeit aufweisen, die sich auch über die Zeit verändern kann, was zusätzlich eine Bestimmung der Kennkurve, sowie deren regelmäßige Nachprüfung und gegebenenfalls auch eine Korrektur der Werte erfordert.

Weitere Anforderungen

Bestimmung der Unsicherheit der Messdaten

Einfache Nachvollziehbarkeit und Darstellung der rechnerischen Korrektheit der oben beschriebenen Qualitätssicherung. Die Ergebnisse sollten möglichst computergestützt rücküberprüft werden können.

Warum ein statistisches Modell zur Automatisierung der Qualitätssicherung?

In der Gesamtsumme sind die oben dargestellten Schritte zur fortlaufenden Qualitätssicherung auch für wissenschaftlich ausgebildetes Personal eine Herausforderung.

Der Zeitaufwand für die manuell auszuwertenden Kalibrationen und die Kontrolle der quantitativen Korrektheit der Daten ist hoch. Je nach individueller Befähigung der bearbeitenden Person können sich Fehler einschleichen und ggf. Korrekturen übersehen werden.

Es kommt vor, dass selbst renommierte Wissenschaftler äußern, dass trotz aller Bemühungen gelegentlich eine Restdifferenz verbleibt, die nicht zugeordnet werden kann. Dies nährt die Vermutung, dass hier möglicherweise ein unterdeterminiertes Problem vorliegen könnte. Rechnerisch quantitativ betrachtet ist diese Situation unbefriedigend und es besteht Grund zur Annahme, dass die Schwierigkeit dieses Problems in der Praxis systematisch unterschätzt wird.

Es gibt aber auch Beispiele, bei denen diese Problematik in der Praxis zufriedenstellend gelöst wird.

Jedoch besteht kein einheitliches Lösungsmodell zur praktischen Anwendung, das konsequent auf Software abgebildet, eine Automatisierung und Standardisierung dieser Arbeitsschritte erlauben würde.

Aufgabenstellung

Analyse des Problems und Erstellen eines Rechen- und Korrekturmodells, das ein softwaregestütztes, schrittweises Berechnen, Kontrollieren und Korrigieren von Kalibrationen erlaubt.

Für die bearbeitende und bedienende Person der später daraus zu erstellenden Softwarelösung soll die Möglichkeit bestehen, die Berechnungen nach Durchführung interaktiv und mit nur geringem Aufwand nachprüfen zu können.

Das Modell sollte in eine bereits bestehende Softwareinfrastruktur integriert werden können. Weitere Unterlagen zu einem bereits verwendeten Datenbankmodell und ein laufendes Client Server System werden zur Verfügung gestellt.

Ansprechpartner:

Dr. Ludwig Ries
Plattform Zuspitze
GAW Globalobservatorium Zugspitze/Hohenpeissenberg
Zugspitze 5
82475 Zugspitze
Tel. 0175 52 800 42