

ГРАНИЦИ НА ДЕТЕКТИРАНЕ И МИНИМАЛНА ДЕТЕКТИРУЕМА АКТИВНОСТ

ТАТЯНА БОШКОВА

Катедра „Атомна физика“

Татяна Бошкова. ГРАНИЦИ НА ДЕТЕКТИРАНЕ И МИНИМАЛНА ДЕТЕКТИРУЕМА АКТИВНОСТ

При измерване на ниски активности особено важна е коректната оценка на статистическата значимост на „чистия“ сигнал (т.е. дали скоростта на броене от пробата е статистически различна от фона). В работата са разгледани някои нива – количествени критерии, които маркират границите, над които вероятността да бъде допусната грешка от първи или втори род става приемливо ниска. В приложение са приведени подробни формули както за случая на интегрално броене, така и за гама-спектрометрия.

Tatiana Boshkova. LEVELS OF DETECTION AND MINIMUM DETECTABLE ACTIVITY

The correct evaluation of the statistic significance of the net signal (i.e., if the sample count rate is statistically different from the background) is extremely important when measuring low activities. Some levels have been considered in this work. These are quantity criteria—limits over which the probability of errors of the first and second kind becomes acceptably low. In Appendix detailed formulas both for integral counting and gamma-ray spectrometry are given.

Keywords: statistic significance, levels of detection, minimum detectable activity (MDA), gamma-ray spectrometry.

PACS number: 20 (23)

1. УВОД

Анализът за съдържание на радионуклиди в една проба включва:

- оценка на активността на пробата (т.е. идентификация и количествена оценка на съдържанието на радионуклиди в пробата);
- оценка на комбинираната неопределеност на крайния резултат;
- оценка на минимално детектируемата активност (МДА) при съответните условия на измерване (за тези от нуклидите, за които не е възможна статистически достоверна количествена оценка на активността им).

Във всяка от тези оценки в неявен вид участва и оценката на фона, тъй като при всяко измерване на проба всъщност се регистрират сумарен брой импулси, дължащи се както на пробата, така и на фона.

При измерване на достатъчно високи активности (такива, при които абсолютната статистическа неопределеност на скоростта на броене от пробата надхвърля многократно фоновата скорост на броене) корекцията за фон става пренебрежима. Водещ проблем в такива случаи е оценката на комбинираната неопределеност на резултата, и по-специално откриването и оценката на източниците на „нестатистическа“ неопределеност. Проблемът с МДА в такива случаи обикновено не се поставя.

В дадени ситуации обаче измерваните (или търсените) активности са относително ниски и скоростта на броене от пробата е съизмерима с фоновата скорост на броене. В такива случаи корекцията за фон е съществена, а водеща компонента на комбинираната неопределеност е статистическата. Основен проблем тук е оценката на МДА при съответните условия на измерване.

Характерно при измерването на ниски активности е, че освен количествено оценената неопределеност на резултата (доскоро наричана „грешка“ на резултата) тук могат да бъдат допуснати и „качествени“ грешки, свързани с проверката на дадената статистическа хипотеза:

- *грешка от първи род* (в конкретния случай: да се твърди, че има активност в пробата, когато в действителност такава няма);
- *грешка от втори род* (в конкретния случай: да се твърди, че няма активност в пробата, когато в действителност такава има).

Именно тези „качествени“ твърдения (има/няма активност в пробата) подлежат на съпоставяне с количествени критерии, които маркират границите (нивата), над които вероятността да бъде допусната грешка от първи или втори род става приемливо ниска. Тук трябва да отбележим, че доколкото активността е пропорционална на броя импулси (съответно на скоростта на броене), то навсякъде по-долу конкретните нива се

оценяват в брой импулси или в скорост на броене. Предполага се, че едва в крайния етап на обработка на резултатите съответното ниво може да бъде оценено в единици активност (посредством даден калибровъчен коефициент).

Първият количествен критерий, с който трябва да сравним един резултат, получен при измерването на ниски активности, е т.нар. критично ниво.

2. КРИТИЧНО НИВО L_C (CRITICAL LEVEL)

Най-общо казано, критичното ниво маркира границата, над която вероятността а да бъде допусната грешка от I род става приемливо ниска (например $\alpha < 5\%$ или $\alpha < 1\%$).

Грешката от I род означава, че е декларирано наличие на активност, когато всъщност такава няма. Но оценката и декларирането на активност са предшествани от:

- оценка на броя импулси N_b при измерване на фона;
- оценка на броя импулси N_s при измерване на пробата;
- оценка на „чистия“ брой импулси $N_0 = N_s - N_b$ (предполагаме дължащи се на активност в пробата).

Тогава, ако просто се приеме, че ненулевата положителна стойност на „чистия“ брой импулси ($N_0 > 0$ при $N_s > N_b$) е достатъчно доказателство за наличие на активност в пробата, то определено съществува вероятност за допускане на грешка от I род, тъй като не е отчетен статистическият характер на процесите, довели до регистрирането на импулсите N_s и N_b . Т.е. не е отчетено, че всяка от тези стойности е само най-вероятната (в рамките на интервала $[N - k\sigma, N + k\sigma]$, където k е коефициент за двустранен доверителен интервал, а $\sigma = \sqrt{N}$ е статистическата неопределеност на регистриран брой импулси N), но не и истинската стойност на величината.

Нека предположим, че действително в измерваната проба няма активност. Тогава всъщност измерването на пробата повтаря измерването на фона и истинската стойност, дължаща се на пробата, е равна на истинската стойност, дължаща се на фона, т.е. $N_{s,ист} = N_{b,ист}$ и $N_{0,ист} = 0$. Реално измерените стойности обаче могат да се окажат различни и именно това различие при $N_s > N_b$ може да доведе до допускане на грешка от I род. От друга страна, известно е, че ако истинските стойности са равни, то разликата между измерените стойности не може да надхвърля рамките на статистическата неопределеност (с определена вероятност). Прилагайки правилото за разпространение на грешките, за статистическата

неопределеност на N_0 получаваме: $\sigma_0^2 = \sigma_s^2 + \sigma_b^2 = N_s + N_b = 2N_b$. Т.е. ако в пробата няма активност и истинската стойност на N_0 е нула, то при реално измерване в 68% от случаите ние ще получаваме резултати за N_0 в рамките на двустранен около нулата интервал: $0 \pm \sqrt{2N_b}$. Доколкото в конкретната задача ние се интересуваме само от положителните стойности на N_0 (само те могат да бъдат източник на грешка от I род), то ще получим, че при липса на активност в пробата измерените стойности на N_s и N_b ще бъдат такива, че в 84% от случаите „чистият“ брой импулси N_0 няма да надхвърля $+\sqrt{2N_b}$. Всъщност тук преминахме към едностранен доверителен интервал, който е свързан с вероятността търсената величина да се намира в интервала $[-\infty, +k_\alpha\sigma]$, където k_α е коефициент за едностранен доверителен интервал при вероятност α за грешка от първи род ($k_\alpha = 1$ за $\alpha = 16\%$, $k_\alpha = 1,65$ за $\alpha = 5\%$, $k_\alpha = 2,33$ за $\alpha = 1\%$).

По този начин, отчитайки статистическия характер на процесите, може да бъде поставена границата L_c , до която може максимално да флукутира „чистият“ брой импулси N_0 (с определена вероятност) при условие, че в пробата няма активност [1,2]:

$$L_c = k_\alpha \cdot \sigma_0. \quad (1)$$

В този смисъл, за да се твърди, че в една проба има активност, не е достатъчно $N_0 > 0$; необходимото условие за статистическа достоверност на подобно твърдение е: $N_0 > L_c$. Тогава вероятността да бъде допусната грешка от първи род става приемливо ниска (5% при $k_\alpha = 1,65$ и само 1% при $k_\alpha = 2,33$).

Условията, при които се дефинира критичното ниво, позволяват то да бъде използвано само като ниво на решение (decision limit), т.е. като база за проверка на статистическата достоверност на „чистия“ брой импулси:

– ако $N_0 > L_c$, то с достатъчна степен на достоверност можем да декларираме наличие на активност в пробата;

– ако $N_0 \leq L_c$, то с достатъчна степен на достоверност можем да твърдим, че измереният брой импулси N_s от пробата е статистически неразличим от фоновия брой импулси N_b .

Въпреки простият вид на израза (1), възможни са някои некоректни подходи при оценката на L_c . Обикновено те се допускат при формално прилагане на изведени за определен случай формули. Това, което е съществено за израза (1), е, че конкретният вид на σ_0 зависи от конкретния тип измерване. Така например, полученият по-горе израз за

$\sigma_0 = \sqrt{2N_b}$ е валиден само при измерване на интегрален брой импулси, и то при равни времена на измерване на фона и пробата. Размерността

както на σ_0 , така и на L_c , е в [imp]. При преминаване към скорости на броене некоректен е следният подход:

$$L_c [\text{imp/s}] = \frac{L_c [\text{imp}]}{T [\text{s}]} = \frac{k_\alpha \sqrt{2N_b}}{T} = k_\alpha \sqrt{2 \frac{n_b}{T}},$$

където n_b е скоростта на броене, а T – времето за измерване на фона. Така полученият израз е верен само при равни времена на измерване на фона и пробата. Коректният вид на критичното ниво при време на из-

мерване на пробата $t \neq T$ е: $L_c = k_\alpha \sqrt{\frac{n_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right)}$ (вж. Приложение).

Приведените дотук примери се отнасят за интегрален брой импулси (например при измерване и оценка на обща бета-активност) и не могат да бъдат директно приложени и в случая на гама-спектрометрия. Първото принципино различие е фонът. Нерядко в гама-спектрометрията са допускани терминологични недоразумения поради недостатъчно изясняване на смисъла на термина „фон“.

В общия случай под фон (фонови импулси, фонов сигнал) се разбира всеки регистриран от детектора сигнал, различен от сигнала, който ни интересува. Доколкото в гама-спектрометрията интересуваният ни сигнал е броят импулси в „чистата“ площ на пика на пълно поглъщане, то всички други регистрирани импулси се разглеждат като фонови. Това са сигнали, свързани както с други източници на лъчение извън пробата, така и с други процеси на взаимодействие (например комптъново разсейване), включително и на лъчение от пробата. За яснота по-нататък ще спазваме следното терминологично разграничение:

- под „фон“ (фонов спектър, фонов пик на пълно поглъщане и пр.) ще разбираме импулсите, регистрирани в спектър, набран без проба, или при наличието на „празна“ (несъдържаща активност) проба;
- фононите импулси, формиращи непрекъснатото разпределение под пика на пълно поглъщане, ще наричаме „подложка“.

Основно правило при гама-спектрометричните измервания е, че всички нива (критично и пр.) се оценяват на базата на спектъра на пробата, т.е. тук изходна точка за оценката на σ_0 е начинът (видът на моделната функция), по който е оценена „подложката“. В болшинството случаи тя се оценява като площ на трапец с основа, равна на броя канали l в областта на пика на пълно поглъщане, и височина, равна на средния брой импулси в $2m$ канала (m канала вляво и m – вдясно от пика). Един от най-често срещаните некоректни подходи е допускането (a priori), че

$l = 2m$, което в общия случай не е вярно. В общия случай m е фиксиран брой канали (най-често зададен от съответния софтуер), докато, както е известно, l зависи от полуширината на пика $FWHM$, която от своя страна зависи от енергията на гама-квантите. Т.е. само в частния случай, когато $l = 2m$, критичното ниво се задава от израз, аналогичен на този за интегралния брой импулси при равни времена на измерване – само тогава статистическата неопределеност $\sigma_0 = \sqrt{2N_b}$ на „чистия“ сигнал при интегрално броене е идентична на статистическата неопределеност $\sigma_0 = \sqrt{2F_s}$, където F_s е броят импулси в „подложката“; в общия случай обаче, $\sigma_0 = \sqrt{F_s(1+l/2m)}$ (вж. Приложение).

Освен това трябва да се има предвид, че в гама-спектрометрията също понякога се налага да се прави корекция за фон – в смисъла на сигнал, регистриран без наличието на проба (например при анализ за съдържание на естествени радионуклиди или при наличие на замърсяване на детектора и/или защитата – т.е. във всички случаи, когато във фоновия спектър се наблюдават пикове на пълно поглъщане в същите енергийни области, които наблюдаваме при анализа на пробата). Тогава статистическата неопределеност на „чистия“ сигнал трябва да отчете и евентуалната разлика във времената на измерване на фона и пробата :

$$\sigma_0 = \sqrt{\frac{a_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right) + \left(\frac{f_s}{t} + \frac{f_b}{T}\right) \left(1 + \frac{l}{2m}\right)},$$

където a_b е „чистата“ скорост на броене в пик на пълно поглъщане от спектъра на фона, f_b – съответната му „подложка“, а f_s – скоростта на броене в „подложката“ на пика от спектъра на пробата. Т.е. само в частния случай, когато $t = T$ и $l = 2m$, изразът

$$\sigma_0 = \sqrt{2 \cdot (A_b + F_b + F_s)},$$

където A_b е „чистият“ брой импулси в пик от спектъра на фона, F_b – броят импулси в съответната му „подложка“, и F_s – броят импулси в „подложката“ на пика от спектъра на пробата. Т.е. използването на последния израз (включително и в софтуера на някои съвременни апарати) без изричната уговорка за $t = T$ и $l = 2m$ е некоректно.

Коректната оценка на критичното ниво L_c е особено важна, защото, от една страна, това е базовото ниво за вземане на решение за статистическа значимост на сигнала, а от друга, защото всички останали нива могат да се изразят с помощта на критичното ниво (вж. Приложение).

3. НИВО „ПО-МАЛКО ОТ“ L_T (LESS-THAN LEVEL)

Както отбелязахме по-горе, при $N_0 > L_c$ можем да твърдим, че измереният от пробата сигнал е статистически достоверно по-голям от фоновия сигнал, което ни позволява да оценим активността в пробата.

За съжаление, при $N_0 \leq L_c$ решението не е така еднозначно. Формалният отговор „няма активност“ с голяма вероятност може да представлява грешка от втори род, тъй като са възможни ситуации, в които, въпреки че в пробата има активност, регистрираният при отделното измерване брой импулси N_s да е такъв, че $N_0 \leq L_c$ при дадените условия на измерване. Всъщност това, което установихме по-горе, е, че при $N_0 \leq L_c$ измереният от пробата сигнал N_s е статистически неразличим от фоновия сигнал N_b при дадените условия на измерване. Но това все още не ни дава основание да твърдим, че в пробата няма активност – още повече, че ако променим условията на измерване (например увеличим времето на измерване на пробата), възможно е да получим $N_0 > L_c$ (естествено оценката на L_c ще бъде при новите условия на измерване). Единственото, което можем да твърдим в подобни ситуации (при $N_0 \leq L_c$), е, че дори да има активност в пробата, тя е „не повече от“ (не повече от оценката за МДА). В този смисъл нивото „по-малко от“ (бихме могли да го наречем и ниво „не повече от“) представлява максималната вярна стойност на „чистия“ брой импулси, който може да се дължи на активност в пробата, при условие че регистрираният вече брой импулси N_s е такъв, че $N_0 \leq L_c$. С други думи, нивото L_t маркира границата, над която вероятността за грешка от втори род става приемливо ниска:

$$L_t = N_0 + k_\beta \cdot \sigma_0. \quad (2)$$

където k_β е коефициент за едностранен доверителен интервал при вероятност за грешка от втори род β .

Именно нивото L_t трябва да се използва при оценка на МДА за дадена измерена вече проба [2] (а не масово използваното и описано по-нататък ниво на детектиране L_D):

$$MDA = \frac{L_t}{\varepsilon \cdot p \cdot t},$$

където ε е ефективността за регистриране на съответното лъчение при дадените условия на измерване, а p – квантовият добив.

И тук, както и при L_c , акцентът е в оценката на σ_0 . Разликите са в изходните физически предпоставки: при оценката на критичното ниво търсим положителната стойност на максималната статистическа флук-

туация на нулевия чист сигнал: $L_c = 0 + k_\alpha \cdot \sigma_0 = k_\alpha \sqrt{2N_b}$; докато при оценката на нивото „по-малко от“ търсим максималната статистическа флуктуация на реално отчетен брой импулси: $L_t = N_0 + k_\beta \cdot \sigma_0 = N_0 + k_\beta \sqrt{N_0 + 2N_b}$.

Както е показано в Приложение, във всички случаи изразът (2) за нивото „по-малко от“ може да бъде представен и като

$$L_t = \text{"net"} + k_\beta \sqrt{\text{"net"} + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}} \text{ [imp]}, \text{ или } L_t = \text{"net"} + k_\beta \sqrt{\frac{\text{"net"}}{t} + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}} \text{ [s}^{-1}\text{]}, \quad (2a)$$

където „net“ е „чистият“ сигнал при съответното измерване. В общия случай $k_\alpha \neq k_\beta$, тъй като в общия случай ние можем да заложим различни вероятности за грешка от първи и втори род $\alpha \neq \beta$. В практиката обаче по-удобно е да приемем, че $\alpha = \beta$ и $k_\alpha = k_\beta = k$.

4. НИВО НА ДЕТЕКТИРАНЕ L_D (DETECTION LIMIT)

Преди да бъдат въведени следващите две нива (L_D и L_Q), особено важно е да се осмисли принципното им различие от разглежданите досега нива (L_c и L_t). Това различие се базира на факта, че задачата за измерване на ниски активности има два фундаментално различни аспекта:

- разполагайки с данните от *вече измерена* проба, да се реши дали полученят „чист“ сигнал е статистически значим и ако не, да се оцени стойността на МДА – тогава именно се използват нивата L_c и L_t . Този аспект на задачата е поставен така, че решението се взема след измерване на пробата, „след опита“ (a posteriori decision);
- разполагайки само с информация за условията на измерване, да се оцени предварително (*преди измерване* на пробата) каква минимално би трябвало да бъде истинската активност в пробата, така че да сме сигурни, че по-късно при отделното реално измерване ще бъде регистриран статистически достоверен „чист“ сигнал. Съществената разлика от предишния случай е, че тук решението се взема преди измерването на пробата, „преди опита“ (a priori estimate).

Използваните във втория случай нива L_D и L_Q , както и свързаните с тях оценки на МДА, носят информация само за възможностите на надежния процес на измерване.

В този смисъл нивото на детектиране L_D представлява предварителна оценка на тази стойност на истинския „чист“ сигнал N_0 , която съответства на минимална активност в пробата, такава, че по-късно при отдел-

ното реално измерване вероятността за грешка от втори род да бъде приемливо ниска – т.е. минималната активност в пробата да е такава, че регистрираният след измерването „чист“ сигнал с голяма вероятност да надхвърля съответното критично ниво [1,2]:

$$L_D = L_c + k_\beta \cdot \sigma_0. \quad (3)$$

Естествено, правилото, че оценките за L_c и σ_0 са специфични за всеки конкретен тип измерване, е валидно и за израза (3). Особеното тук е, че стойностите на L_D и σ_0 са свързани (по дефиниция $L_D = N_0 = N_s - N_b$ и $\sigma_0^2 = N_s + N_b = L_D + 2N_b$), което води до решаване на квадратно уравнение спрямо L_D – например при интегрален брой импулси: $L_D = L_c + k_\beta \sqrt{L_D + 2N_b}$, чието решение при $k_\alpha = k_\beta = k$ е: $L_D = 2L_c + k^2$ [imp]. Трябва да отбележим, че във всички случаи нивото на детектиране L_D може да се изрази чрез съответстващото на конкретното измерване критично ниво L_c , като при размерност $[s^{-1}]$ общият вид е: $L_D = 2L_c + \frac{k^2}{t}$ при $k_\alpha = k_\beta = k$. Все пак трябва да се има предвид, че при $\alpha \neq \beta$ и $k_\alpha \neq k_\beta$, общият вид на решението е по-сложен (вж. Приложение).

Една често срещана некоректност при оценките на L_D е даването на готово на числовата стойност на k^2 (например 2,71). Вярно е, че $k^2 \approx 2,71$, но само в частния случай на $\alpha = \beta = 5\%$, т.е. това условие трябва изрично да бъде указано, така че в оценките на съответното критично ниво да залегне същата стойност на $k = 1,65$.

5. НИВО НА ОПРЕДЕЛЯНЕ L_Q (DETERMINATION LIMIT)

Една от концепциите за МДА [1,2] дефинира нивото L_Q като този минимален „чист“ сигнал от пробата, който би могъл да бъде регистриран с дадена относителна статистическа неопределеност $\delta_0 = \frac{\sigma_0}{N_0}$:

$$L_Q = q \cdot \sigma_0, \quad (4)$$

където q е реципрочната стойност на желаната относителна неопределеност на „чистия“ сигнал: $q = \frac{1}{\delta_0}$.

И в този случай стойностите на L_Q и σ_0 са свързани ($L_Q = N_0 = N_s - N_b$ и $\sigma_0^2 = N_s + N_b = L_Q + 2N_b$), което води до решаване на квадратно уравнение спрямо L_Q – например в случая на интегрален брой импулси:

$$L_Q = q \sqrt{L_Q + 2N_b}, \text{ чието решение е: } L_Q = \frac{q^2}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{8N_b}{q^2}} \right].$$

Във всички случаи нивото на определяне L_Q може да се изрази чрез съответстващото на конкретното измерване критично ниво L_c , като при

размерност $[s^{-1}]$ общият вид е: $L_Q = \frac{q^2}{2 \cdot t} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4L_c^2 \cdot t^2}{k_a^2 \cdot q^2}} \right]$ (вж. Приложение).

Нивото на определяне L_Q (подобно на нивото L_D) представлява отговор на въпрос, зададен преди измерването на пробата, т.е. каква би трябвало да бъде активността в пробата, така че при реалното ѝ измерване за време t да получим „чист“ сигнал с относителна статистическа

неопределеност $\delta_0 = \frac{1}{q}$.

6. ПРИЛОЖЕНИЕ

Използвани символи :

N – брой импулси (при интегрално броене);

n $[s^{-1}]$ – скорост на броене (при интегрално броене);

σ – статистическа неопределеност (абсолютна);

T $[s]$ – време на измерване на фона;

t $[s]$ – време на измерване на пробата;

G – общ (интегрален, Gross) брой импулси в областта на пика на пълно поглъщане (при гама-спектрометрия);

g $[s^{-1}]$ – съответната на G скорост на броене;

F – брой импулси в „подложката“ на пика на пълно поглъщане (при гама-спектрометрия);

f $[s^{-1}]$ – съответната на F скорост на броене;

A – брой импулси в „чистата“ площ (net area) на пика на пълно поглъщане (при гама-спектрометрия);

a $[s^{-1}]$ – съответната на A скорост на броене;

l – брой канали в областта на пика на пълно поглъщане (при гама-спектрометрия);

m – брой канали (вляво и вдясно от пика), по които се оценява средния брой импулси в „подложката“ (при гама-спектрометрия);

N_i – брой импулси в канал i (при гама-спектрометрия);

k – коефициент за едностранен доверителен интервал.

Използвани индекси:

s – проба (sample); b – фон (background); 0 – „чист“ сигнал;

α (β) – вероятност за грешка от първи (втори) род.

6.1. ОЦЕНКА НА КРИТИЧНОТО НИВО L_c ПРИ РАЗЛИЧЕН
ТИП ИЗМЕРВАНИЯ

$$L_c = k_\alpha \cdot \sigma_0$$

А. Измерване на интегрален брой импулси

А.1. Оценка на L_c [imp] при $t = T$:

$$N_0 = N_s - N_b = 0 \rightarrow \sigma_0 = \sqrt{\sigma_s^2 + \sigma_b^2} = \sqrt{N_s + N_b} = \sqrt{2N_b},$$

$$L_c = k_\alpha \cdot \sqrt{2N_b}.$$

А.2. Оценка на L_c [s⁻¹] при $t \neq T$:

$$n_0 = n_s - n_b = 0 \rightarrow \sigma_0 = \sqrt{\sigma_s^2 + \sigma_b^2} = \sqrt{\frac{n_s}{t} + \frac{n_b}{T}} = \sqrt{\frac{n_b}{t} + \frac{n_b}{T}} = \sqrt{\frac{n_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right)},$$

$$L_c = k_\alpha \cdot \sqrt{\frac{n_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right)}.$$

В. Гама-спектрометрични измервания

В.1. Оценка на L_c [imp] само по спектъра на пробата ($t \equiv T$) (когато във фоновия спектър липсват пикове на пълно поглъщане с енергии в областите на интерес).

Случай I: *В областта на интерес от спектъра на пробата не се формира дори и слаб пик.*

Около канала, в който би трябвало да се намира центроидът на изследваната гама-линия, се маркира област на интерес с брой канали $l = 1,2 \cdot FWHM + 1$, като се закръгля към по-високата стойност [3] и се

оценява броят импулси $G_s = \sum_{i=1}^l N_{i,s}$.

$$N_0 = G_s - F_s = 0 \rightarrow G_s \equiv F_s; \quad \sigma_0 = \sqrt{G_s + F_s} = \sqrt{2G_s}, \quad L_c = k_\alpha \cdot \sqrt{2G_s}.$$

Случай II: *В областта на интерес от спектъра на пробата се формира слаб пик, чиято статистическа достоверност трябва да бъде проверена.*

В общия случай $l \neq 2m$ ($l \approx 2,55 \cdot FWHM$ – при предположение за област на интерес в рамките на $\pm 3s$ за пик с гаусово разпределение):

$$N_0 \equiv A_s = G_s - F_s = 0 \rightarrow G_s = F_s; \quad G_s = \sum_{i=1}^l N_{i,s},$$

$$F_s = \frac{l}{2m} \left(\sum_{i=1}^m N_{i,s} + \sum_{j=1}^m N_{j,s} \right), \quad \sigma_{G_s} = \sqrt{G_s}, \quad \sigma_{F_s} = \frac{l}{2m} \sqrt{\left(\sum_{i=1}^m N_{i,s} + \sum_{j=1}^m N_{j,s} \right)},$$

$$\sigma_0 \equiv \sigma_A = \sqrt{\sigma_G^2 + \sigma_F^2} = \sqrt{G_s + \frac{l}{2m} F_s} = \sqrt{F_s + \frac{l}{2m} F_s} = \sqrt{F_s \left(1 + \frac{l}{2m} \right)},$$

$$L_c = k_\alpha \cdot \sqrt{F_s \left(1 + \frac{l}{2m} \right)}.$$

В частния случай при $l = 2m \rightarrow L_c = k_\alpha \sqrt{2F_s}$.

Забележка: Приведените по-горе (случай I и случай II) оценки за L_c [imp] могат да бъдат директно приведени в единици $[s^{-1}]$: $L_c[s^{-1}] = L_c[\text{imp}]/t$, тъй като в случая оценките са само по спектъра на пробата и $t \equiv T$.

В.2. Оценка на $L_c [s^{-1}]$ по спектъра на пробата и фонов спектър ($t \neq T$)

$$a_0 = a_s - a_b = 0 \rightarrow \sigma_0 \equiv \sigma_{a,0} = \sqrt{\sigma_{a,s}^2 + \sigma_{a,b}^2},$$

$$a_s = g_s - f_s \neq 0 \rightarrow \sigma_{a,s}^2 = \sigma_{g,s}^2 + \sigma_{f,s}^2,$$

$$g_s = \frac{G_s}{t} \rightarrow \sigma_{g,s}^2 = \frac{\sigma_{G,s}^2}{t^2} = \frac{g_s}{t}; \quad f_s = \frac{F_s}{t} \rightarrow \sigma_{f,s}^2 = \frac{\sigma_{F,s}^2}{t^2} = \frac{l}{2m} \cdot \frac{f_s}{t},$$

$$\sigma_{a,s}^2 = \sigma_{g,s}^2 + \sigma_{f,s}^2 = \frac{g_s}{t} + \frac{l}{2m} \cdot \frac{f_s}{t} = \frac{a_s + f_s}{t} + \frac{l}{2m} \cdot \frac{f_s}{t} = \frac{a_s}{t} + \frac{f_s}{t} \left(1 + \frac{l}{2m} \right).$$

Аналогично може да се покаже, че

$$\sigma_{a,b}^2 = \sigma_{g,b}^2 + \sigma_{f,b}^2 = \frac{g_b}{T} + \frac{l}{2m} \cdot \frac{f_b}{T} = \frac{a_b + f_b}{T} + \frac{l}{2m} \cdot \frac{f_b}{T} = \frac{a_b}{T} + \frac{f_b}{T} \left(1 + \frac{l}{2m} \right).$$

Тогава:

$$\begin{aligned} \sigma_0^2 \equiv \sigma_{a,0}^2 &= \sigma_{a,s}^2 + \sigma_{a,b}^2 = \frac{a_s}{t} + \frac{f_s}{t} \left(1 + \frac{l}{2m} \right) + \frac{a_b}{T} + \frac{f_b}{T} \left(1 + \frac{l}{2m} \right) = \\ &= \frac{a_b}{t} + \frac{a_b}{T} + \left(\frac{f_s}{t} + \frac{f_b}{T} \right) \left(1 + \frac{l}{2m} \right) = \frac{a_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t} \right) + \left(\frac{f_s}{t} + \frac{f_b}{T} \right) \left(1 + \frac{l}{2m} \right), \end{aligned}$$

$$L_c = k_\alpha \sqrt{\frac{a_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t} \right) + \left(\frac{f_s}{t} + \frac{f_b}{T} \right) \cdot \left(1 + \frac{l}{2m} \right)}.$$

В частния случай при $t = T$ и $l = 2m \rightarrow L_c = k_\alpha \sqrt{\frac{2(a_b + f_b + f_s)}{T}}$ [s⁻¹], или
 $L_c = k_\alpha \sqrt{2(A_b + F_b + F_s)}$ [imp].

С. Измервания с неизвестно стандартно отклонение

В горните случаи се предполага, че разпределението, на което се подчинява регистрираният брой импулси N , по същество е поасоново и $\sigma(N) = \sqrt{N}$. Ако това не е предварително известно, то възможно е да се проведе серия от m независими измервания на фона, всяко за време, равно на времето на измерване на пробата. Тогава търсената стойност на

фоновия брой импулси N_b се оценява като средна стойност: $\bar{N}_b = \frac{\sum N_{b,i}}{m}$,

където $N_{b,i}$ представлява отчетеният при i -тото измерване брой импулси от фона, m – брой измервания ($m \geq 10$).

Ако фонът е оценен като средна стойност от серия m независими измервания, то стойността на σ_s ще се определя от стойността на стандартното отклонение SD на *отделното измерване*:

$\sigma_s \equiv SD = \sqrt{\frac{\sum (N_{b,i} - \bar{N}_b)^2}{m-1}}$, а стойността на σ_b ще се определя от стойността

на стандартното отклонение на *средната стойност*, т.е.:

$$\sigma_b = \sqrt{\frac{\sum (N_{b,i} - \bar{N}_b)^2}{m(m-1)}} = \frac{SD}{\sqrt{m}}.$$

Тогава стойността на статистическата неопределеност σ_0 на „чистия сигнал“ $N_0 = N_s - \bar{N}_b$ ще се дава от

$$\sigma_0 = \sqrt{\sigma_s^2 + \sigma_b^2} = \sqrt{SD^2 + \frac{SD^2}{m}} = \sqrt{SD^2 \left(1 + \frac{1}{m}\right)} = SD \sqrt{\left(1 + \frac{1}{m}\right)},$$

$$L_c = k_\alpha SD \sqrt{1 + \frac{1}{m}}.$$

6.2. ОЦЕНКА НА НИВОТО „ПО-МАЛКО ОТ“ L_T
ПРИ РАЗЛИЧЕН ТИП ИЗМЕРВАНИЯ

$$L_t = N_0 + k_\beta \cdot \sigma_0$$

А. Измерване на интегрален брой импулси

А.1. Оценка на L_t [imp] при $t = T$:

$$N_0 = N_s - N_b \neq 0 \rightarrow \sigma_0 = \sqrt{\sigma_s^2 + \sigma_b^2} = \sqrt{N_s + N_b} = \sqrt{N_0 + 2N_b}$$

В конкретния случай $L_c = k_\alpha \cdot \sqrt{2N_b}$, откъдето: $2N_b = \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}$. Тогава:

$$L_t = N_0 + k_\beta \sqrt{N_0 + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}}$$

А.2. Оценка на L_t [s⁻¹] при $t \neq T$:

$$n_0 = n_s - n_b \neq 0 \rightarrow \sigma_0 = \sqrt{\sigma_s^2 + \sigma_b^2} = \sqrt{\frac{n_s}{t} + \frac{n_b}{T}} = \sqrt{\frac{n_0 + n_b}{t} + \frac{n_b}{T}} = \sqrt{\frac{n_0}{t} + \frac{n_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right)}$$

В конкретния случай $L_c = k_\alpha \cdot \sqrt{\frac{n_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right)}$, откъдето $\frac{n_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right) = \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}$.

Тогава: $L_t = n_0 + k_\beta \sqrt{\frac{n_0}{t} + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}}$.

В. Гама-спектрометрични измервания

Лесно може да бъде показано, че и в случая на гама-спектрометрични измервания

$$L_t = \text{"net"} + k_\beta \sqrt{\text{"net"} + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}} \text{ [imp]}, \text{ или } L_t = \text{"net"} + k_\beta \sqrt{\frac{\text{"net"}}{t} + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}} \text{ [s}^{-1}\text{]},$$

където: „net“ е интересувания ни в конкретното измерване „чист“ сигнал, за който проверката за статистическа значимост е показала „net“ ≤ L_c ; L_c – стойността на критичното ниво, коректно оценена за всеки конкретен случай (вж. по-горе).

Например за оценка на L_t [s⁻¹] по спектъра на пробата и фонов спектър ($t \neq T$):

$$a_0 = a_s - a_b \neq 0 \rightarrow a_s = a_0 + a_b; \sigma_0 \equiv \sigma_{a,0} = \sqrt{\sigma_{a,s}^2 + \sigma_{a,b}^2},$$

$$\sigma_{a,s}^2 = \frac{a}{t} + \frac{f_s}{t} \left(1 + \frac{l}{2m}\right), \quad \sigma_{a,b}^2 = \frac{a}{T} + \frac{f_b}{T} \left(1 + \frac{l}{2m}\right) \quad (\text{вж. по-горе}),$$

$$\begin{aligned} \sigma_0^2 &\equiv \sigma_{a,0}^2 = \sigma_{a,s}^2 + \sigma_{a,b}^2 = \frac{a}{t} + \frac{f_s}{t} \left(1 + \frac{l}{2m}\right) + \frac{a}{T} + \frac{f_b}{T} \left(1 + \frac{l}{2m}\right) = \\ &= \frac{a}{t} + \frac{a}{T} + \left(\frac{f_s}{t} + \frac{f_b}{T}\right) \cdot \left(1 + \frac{l}{2m}\right) = \frac{a}{t} + \frac{a}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right) + \left(\frac{f_s}{t} + \frac{f_b}{T}\right) \cdot \left(1 + \frac{l}{2m}\right). \end{aligned}$$

В конкретния случай $L_c = k_\alpha \sqrt{\frac{a}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right) + \left(\frac{f_s}{t} + \frac{f_b}{T}\right) \cdot \left(1 + \frac{l}{2m}\right)}$, откъдето:

$$\frac{a}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right) + \left(\frac{f_s}{t} + \frac{f_b}{T}\right) \cdot \left(1 + \frac{l}{2m}\right) = \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}.$$

Тогава: $L_t = a_0 + k_\beta \sqrt{\frac{a_0}{t} + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}}$.

Забележка: В общия случай $L_t > L_c$ при статистически незначим *положителен* „чист“ сигнал ($0 < „net“ \leq L_c$). Поради статистическия характер на процесите обаче е възможно „net“ ≤ 0 . В тези случаи се приема,

че „net“ = 0 и $L_t = \frac{k_\beta}{k_\alpha} \cdot L_c$, или $L_t = L_c$ при $k_\alpha = k_\beta$.

6.3. ОЦЕНКА НА НИВОТО НА ДЕТЕКТИРАНЕ L_D ПРИ РАЗЛИЧЕН ТИП ИЗМЕРВАНИЯ

$$L_D = L_c + k_\beta \cdot \sigma_0$$

А. Измерване на интегрален брой импулси

А.1. Оценка на L_D [imp] при $t = T$:

$$N_0 = N_s - N_b = L_D \rightarrow \sigma_0 = \sqrt{\sigma_s^2 + \sigma_b^2} = \sqrt{N_s + N_b} = \sqrt{L_D + 2N_b}.$$

В конкретния случай $2N_b = \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}$ (вж. по-горе) и $L_D = L_c + k_\beta \sqrt{L_D + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}}$.

Решението на това уравнение спрямо L_D води до

$$L_D = L_c + \frac{k_\beta^2}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4L_c}{k_\beta^2} + \frac{4L_c^2}{k_\alpha^2 k_\beta^2}} \right].$$

В частния случай при $\alpha = \beta$ и $k_\alpha = k_\beta = k \rightarrow L_D = k^2 + 2L_c$.

А.2. Оценка на L_D [s⁻¹] при $t \neq T$:

$$n_0 = n_s - n_b = L_D \rightarrow n_s = L_D + n_b; \quad n_s = \frac{N_s}{t}, \quad n_b = \frac{N_b}{t};$$

$$\sigma_0 = \sqrt{\sigma_s^2 + \sigma_b^2} = \sqrt{\frac{n_s}{t} + \frac{n_b}{T}} = \sqrt{\frac{L_D + n_b}{t} + \frac{n_b}{T}} = \sqrt{\frac{L_D}{t} + \frac{n_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right)}.$$

В конкретния случай $\frac{n_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right) = \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}$ (вж. по-горе) и

$$L_D = L_c + k_\beta \sqrt{\frac{L_D}{t} + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}}.$$

Решението на това уравнение спрямо L_D води до

$$L_D = L_c + \frac{k_\beta^2}{2 \cdot t} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4L_c}{k_\beta^2} t + \frac{4L_c^2}{k_\alpha^2 k_\beta^2} t^2} \right].$$

В частния случай при $\alpha = \beta$ и $k_\alpha = k_\beta = k \rightarrow L_D = k^2/t + 2L_c$.

В. Гама-спектрометрични измервания

Може да бъде показано, че във всички случаи се стига до някое от горните уравнения, чиито общи решения спрямо L_D са показани по-горе. Само трябва да се има предвид, че конкретният вид на L_c ще се определя от всеки конкретен случай.

6.4. ОЦЕНКА НА НИВОТО НА ОПРЕДЕЛЯНЕ L_Q ПРИ РАЗЛИЧЕН ТИП ИЗМЕРВАНИЯ

$$L_Q = q \cdot \sigma_0,$$

където q е реципрочната стойност на желаната относителна статистичес-

ка неопределеност на „чистия“ сигнал: $q = \frac{1}{\delta_0}$, $\delta_0 = \frac{\sigma_0}{N_0}$.

А. Измерване на интегрален брой импулси

А.1. Оценка на L_Q [имр] при $t = T$:

$$N_0 = N_s - N_b = L_Q \rightarrow \sigma_0 = \sqrt{\sigma_s^2 + \sigma_b^2} = \sqrt{N_s + N_b} = \sqrt{L_Q + 2N_b}.$$

В конкретния случай $2N_b = \frac{L_c^2}{k_a^2}$ (вж. по-горе), и $L_Q = q\sqrt{L_Q + \frac{L_c^2}{k_a^2}}$.

Решението на това уравнение спрямо L_Q води до

$$L_Q = \frac{q^2}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4L_c^2}{k_a^2 q^2}} \right].$$

А.2. Оценка на L_Q [s⁻¹] при $t \neq T$:

$$n_0 = n_s - n_b = L_Q \rightarrow n_s = L_Q + n_b; \quad n_s = \frac{N_s}{t}, \quad n_b = \frac{N_b}{t};$$

$$\sigma_0 = \sqrt{\sigma_s^2 + \sigma_b^2} = \sqrt{\frac{n_s}{t} + \frac{n_b}{T}} = \sqrt{\frac{L_Q + n_b}{t} + \frac{n_b}{T}} = \sqrt{\frac{L_Q}{t} + \frac{n_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right)}.$$

В конкретния случай $\frac{n_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right) = \frac{L_c^2}{k_a^2}$ (вж. по-горе) и $L_Q = q\sqrt{\frac{L_Q}{t} + \frac{L_c^2}{k_a^2}}$.

Решението на това уравнение спрямо L_Q води до

$$L_Q = \frac{q^2}{2 \cdot t} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4L_c^2}{k_a^2 q^2} t^2} \right].$$

В. Гама-спектрометрични измервания

Може да бъде показано, че във всички случаи се стига до някое от горните уравнения, чиито общи решения спрямо L_Q са показани по-горе. Само трябва да се има предвид, че конкретният вид на L_c ще се определя от всеки конкретен случай.

6.5. Някои числени примери

1. При анализ на обща бета-активност (без защита) са получени следните стойности:

при измерване на фон за 15 min: $N_b = 473$ имр;

при измерване на проба за 15 min: $N_s = 530$ имр;

$$N_0 = N_s - N_b = 57 \text{ imp} \text{ и } L_c = 1,65 \cdot \sqrt{2 \cdot 473} = 50,75 \text{ imp}.$$

Тогава $N_0 > L_c$, т.е. *чистият сигнал е статистически значим*; необ-

ходимо е да се оцени съответстващата на N_0 активност, като: $A = \frac{N_0}{\varepsilon \cdot p \cdot t}$.

При така направените оценки съществува вероятност за грешка от I род $\alpha = 5\%$.

2. При анализ на обща бета-активност (със защита) са получени следните стойности:

при измерване на фон за 300 min: $N_b = 1545 \text{ imp}$ ($n_b = 0,0858 \text{ s}^{-1}$);

при измерване на проба за 15 min: $N_s = 90 \text{ imp}$ ($n_s = 0,100 \text{ s}^{-1}$)

$$n_0 = n_s - n_b = 0,0142 \text{ s}^{-1} \text{ и } L_c = 1,65 \cdot \sqrt{\frac{0,0858}{18000} \left(1 + \frac{18000}{900}\right)} = 0,0165 \text{ s}^{-1} (\alpha = 5\%).$$

Тогава $N_0 < L_c$, т.е. *чистият сигнал е статистически незначим*; необходимо е да се оцени нивото L_t („по-малко от“) и съответната стойност на МДА:

$$L_t = n_0 + k_\beta \sqrt{\frac{n_0}{t} + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}} = 0,0142 + 1,65 \sqrt{\frac{0,0142}{900} + \frac{0,0165^2}{1,65^2}} = 0,0320 \text{ s}^{-1},$$

$$MDA = \frac{L_t}{\varepsilon \cdot p}.$$

3. При гама-спектрометричен анализ на проба минерал в областта 662 keV се формира слаб пик. Във фонов спектър не се наблюдава пик на ^{137}Cs . При измерването са получени следните стойности:

$FWHM = 1,5 \text{ keV} = 3 \text{ канала} \rightarrow l = 2,55 \cdot FWHM \approx 8 \text{ канала}$;

$m = 3 \text{ канала} \rightarrow 2m = 6 \text{ канала}$;

$G_s = 256 \text{ imp}$, $A_s = 24 \text{ imp}$, $F_s = 232 \text{ imp}$ (за време на измерване 55 000 s);

$$L_c = k_\alpha \cdot \sqrt{F_s \left(1 + \frac{l}{2m}\right)} = 1,65 \cdot \sqrt{232 \left(1 + \frac{8}{6}\right)} = 38,4 \text{ imp}.$$

Тогава $N_0 \equiv A_s < L_c$, т.е. *чистият сигнал е статистически незначим*; необходимо е да се оцени нивото L_t („по-малко от“) и съответната стойност на МДА:

$$L_t = A_s + k_\beta \sqrt{A_s + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}} = 24 + 1,65 \sqrt{24 + \frac{38,4^2}{1,65^2}} = 63,2 \text{ imp};$$

$$MDA = \frac{L_t}{\varepsilon \cdot p \cdot t}$$

4. При гама-спектрометричен анализ на проба вода, в областта 662 keV не се формира дори и слаб пик. Задачата е ориентирана към оценка на МДА в смисъла на *a priori*-оценка. При измерването са получени следните стойности:

$$FWHM = 1,5 \text{ keV} = 3 \text{ канала} \rightarrow l = 1,2 \cdot FWHM + 1 \approx 5 \text{ канала};$$

$$G_s = 5 \text{ imp (за време на измерване 1000 s)};$$

$$L_c = 1,65 \cdot \sqrt{2 \cdot 5} = 5,2 \text{ imp (при вероятност за грешка от I род } \alpha = 5\%);$$

$$L_D = k^2 + 2 \cdot L_c = 1,65^2 + 2 \cdot 5,2 = 13,1 \text{ imp};$$

$$MDA = \frac{L_D}{\varepsilon \cdot p \cdot t}$$

5. При гама-спектрометричен анализ на проба вода в областта 1462 keV се формира слаб пик. Във фонов спектър се наблюдава съответният пик на ^{40}K . При измерването са получени следните стойности:

$$FWHM = 2,2 \text{ keV} = 4,4 \text{ канала} \rightarrow l = 2,55 \cdot FWHM \approx 11 \text{ канала};$$

$$m = 3 \text{ канала} \rightarrow 2m = 6 \text{ канала};$$

$$G_s = 27 \text{ imp}, A_s = 12 \text{ imp}, F_s = 15 \text{ imp (за време на измерване 4000 s)};$$

$$G_b = 1364 \text{ imp}, A_b = 1014 \text{ imp}, F_b = 350 \text{ imp (за време на измерване 500000 s)};$$

$$g_s = 0,00675 \text{ s}^{-1}, a_s = 0,00300 \text{ s}^{-1}, f_s = 0,00375 \text{ s}^{-1};$$

$$g_b = 0,00273 \text{ s}^{-1}, a_b = 0,00203 \text{ s}^{-1}, f_b = 0,00070 \text{ s}^{-1};$$

$$a_0 = a_s - a_b = 0,00097 \text{ s}^{-1};$$

$$\begin{aligned} L_c &= k_\alpha \sqrt{\frac{a_b}{T} \left(1 + \frac{T}{t}\right) + \left(\frac{f_s}{t} + \frac{f_b}{T}\right) \cdot \left(1 + \frac{l}{2m}\right)} = \\ &= 1,65 \sqrt{\frac{0,00203}{500000} \left(1 + \frac{500000}{4000}\right) + \left(\frac{0,00375}{4000} + \frac{0,00070}{500000}\right) \cdot \left(1 + \frac{11}{6}\right)} = 0,00294 \text{ s}^{-1}. \end{aligned}$$

Тогава $N_0 \equiv a_0 < L_c$, т.е. *чистият сигнал е статистически незначим*; необходимо е да се оцени нивото L_t („по-малко от“) и съответната стойност на МДА:

$$L_t = a_0 + k_\beta \sqrt{\frac{a_0}{t} + \frac{L_c^2}{k_\alpha^2}} = 0,00097 + 1,65 \sqrt{\frac{0,00097}{4000} + \frac{0,00294^2}{1,65^2}} = 0,00402 \text{ s}^{-1},$$

$$MDA = \frac{L_t}{\varepsilon \cdot p}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Currie L. A. *Anal. Chem.* **40**, 3, 1968,586.
2. Lochamy J. C. *Eg&G ORTEC, Systems Application Studies*, **PSD No 17**, 1981.
3. Debertin K. and R. G. Helmer. *Gamma- and X-Ray Spectrometry with Semiconductor Detectors*, North-Holland, 1988.

Постъпила декември 2005

Татяна Бошкова
Софийски университет „Св. Климент Охридски“
Физически факултет
Катедра „Атомна физика“
Бул. „Джеймс Баучер“ 5
1164 София, България
E-mail: dream@phys.uni-Sofia.bg