

**KIS BEÜTÉSSZÁMÚ GAMMA-SPEKTRUMOK  
KIÉRTÉKELÉSE**

**DOKTORI (PhD) ÉRTEKEZÉS**

**Demény Orsolya**

**Témavezetők: Dr. Méray László**

**Dr. Révay Zsolt**

**Fizikai kémia program**

**Radioanalitika alprogram (FK3)**

**Veszprémi Egyetem, Fizika Tanszék**

**2002**

## KIS BEÜTÉSSZÁMÚ GAMMA-SPEKTRUMOK KIÉRTÉKELÉSE

Értekezés doktori (PhD) fokozat elnyerése érdekében

Írta: Demény Orsolya

Készült a Veszprémi Egyetem fizikai kémia program  
radioanalitika (FK3) alprogramja keretében

Témavezető: Dr. Révay Zsolt

Elfogadásra javaslom (igen / nem)

(aláírás)

A jelölt a doktori szigorlaton .....%-ot ért el,

Veszprém,

.....  
a Szigorlati Bizottság elnöke

Az értekezést bírálóként elfogadásra javaslom:

Bíráló neve: ..... igen / nem

.....  
(aláírás)

Bíráló neve: ..... igen / nem

.....  
(aláírás)

A jelölt az értekezés nyilvános vitáján ..... %-ot ért el

Veszprém,

.....  
a Bíráló Bizottság Elnöke

A doktori (PhD) oklevél minősítése.....

Veszprém,

.....  
az EDT elnöke

**Tartalomjegyzék**

<b>Kivonat (magyar, angol, német nyelven)</b>	
<b>Bevezetés</b>	6
<b>IRODALMI ÁTTEKINTÉS</b>	
<b>1. A felhasznált matematikai apparátus</b>	7
<b>1.1 Valószínűségszámítási alapok</b>	7
1.1.1 Néhány fontos valószínűségeloszlás	9
1.1.2 Valószínűségeloszlások közelíthetősége	13
1.1.3 A Bayes-tétel és az inverz valószínűség	17
<b>1.2 Statisztikai alapok</b>	18
1.2.1 A legkisebb négyzetek módszere	19
1.2.2 A maximum likelihood módszer	21
1.2.3 A hibabecsléssel kapcsolatos további megfontolások	23
<b>1.3 A radioaktív bomlás statisztikája</b>	24
<b>2. Spektrumok</b>	29
2.1 A spektrumok létrejötte	29
2.2 Spektrumok szimulációja	30
2.3 A spektrumkiértékelés szokásos módjai	33
2.3.1 Kiértékelés a legkisebb négyzetek módszerével	34
2.3.2 Kiértékelés a maximum likelihood módszerrel	35
2.4 A teljes valószínűségi módszer	37
2.5 Kimutatási határ (Currie definíciója)	44
<b>ELMÉLETI ÉS KÍSÉRLETI EREDMÉNYEK</b>	
<b>3. Kimutatási határ</b>	49
3.1 Meghatározás Poisson-eloszlás feltételezésével	49
3.2 Meghatározás a teljes valószínűségi módszerrel	54
<b>4. Szimulált spektrumok kiértékelése</b>	59
4.1 A kiértékelés általános elvei	60
4.1.1 Kiértékelés a legkisebb négyzetek módszerével	60
4.1.2 Kiértékelés a maximum likelihood módszerrel	62
4.1.3 Kiértékelés a teljes valószínűségi módszerrel	64
4.2 Az eredmények értékelése	68
4.3 Az intervallumba esés valószínűsége	75
<b>5. Mért spektrumok kiértékelése</b>	79
5.1 A teljes valószínűségi módszer tesztelése mért gamma-spektrumokon	79

### **Összefoglalás**

90

### **Irodalom**

### **Köszönetnyilvánítás**

### **Kivonat**

Az elvégzett vizsgálatok célja a teljes valószínűségi módszernek elnevezett új spektrumkiértékelő eljárás tesztelése, összehasonlítása a szokásos módszerekkel, alkalmazási területének bővítése és végül a módszer gyakorlati alkalmazhatóságához szükséges technikai feltételek megteremtése volt.

A teljes valószínűségi módszert eredményesen alkalmaztuk a kimutatási határ és más analitikai küszöbértékek meghatározásánál, használata a kimutatási határt egyértelműen csökkenti.

A módszer összehasonlítása a spektrumkiértékelésnél használt szokásos módszerekkel (a súlyozott legkisebb négyzetek módszerével ill. a Poisson-eloszlásra alkalmazott maximum likelihood elvvel) nagy számú szimulált spektrumrészlet kiértékelésével valósult meg. Az új módszer kis beütésszámú spektrumok kiértékelésében minden szempontból pontosabbnak bizonyult a szokásos eljárásoknál.

A teljes valószínűségi módszer bevezetése az analitikai gyakorlatba két lépcsőben történt: először jól ismert területű csúcsokkal rendelkező mért gamma-spektrum kiértékelésére került sor az új módszerrel, és a kiértékelésre rutinszerűen használt, kereskedelmi forgalomban levő szoftverrel. A teljes valószínűségi módszer a csúcsterületek becslésében kis mértékben, a csúcsterületek hibájának becslésében pedig jelentősen jobbnak bizonyult. Második lépcsőben egy, a kereskedelmi forgalomban levő kiértékelő program számára megoldhatatlan radioanalitikai probléma sikeres megoldására került sor az új módszerrel.

Az elvégzett vizsgálatok és fejlesztések alapján a teljes valószínűségi módszer egyértelműen alkalmas kis beütésszámú gamma-spektrumok kiértékelésére, és eredményesen veszi fel a versenyt a szokásosan használt eljárásokkal.

## **Abstract**

A new gamma spectrum evaluation procedure, the total likelihood method is investigated in the thesis. TLM is tested and compared with the common techniques, the least squares or maximum likelihood methods. An algorithm for solving real evaluation tasks is also presented. The author successfully adapts the total likelihood principle for calculation of detection limit and of other analytical limits. The effectiveness of the method is shown in the evaluation of simulated and measured low count gamma-ray spectra. A practical application of this powerful tool is also presented.

## **Auszug**

In den Thesen ein neues Verfahren für die Auswertung von Gamma-Spektren, die sogenannte Methode der vollen Wahrscheinlichkeit wurde investigated. Die VWM wurde geprüft und mit den üblichen Verfahren verglichen, und zwar mit dem Prinzip der kleinsten Quadrate und mit der Maximum-Likelihood-Methode. Auch ein Algorithmus für die Lösung von realen Auswertungsaufgaben ist präsentiert. Die Autorin adaptiert mit Erfolg das Prinzip der vollen Wahrscheinlichkeit zur Berechnung von der Nachweisgrenze und von anderen Grenzwerte der Analytik. Die Wirksamkeit der Methode ist an Auswertung von simulierten und von gemessenen Gamma-Spektren geringer Impulszahl nachgewiesen. Auch eine praktische Anwendung von diesem kraftvollen Mittel ist präsentiert.

## Bevezetés

A nukleáris spektrumok kiértékelésének elmélete régóta gyakorlatilag lezártnak tekinthető. A mérési módszer- ill. detektor-specifikus kiértékelő szoftverekbe ugyan belekerülnek újabb kiegészítő algoritmusok, az alapelvek azonban változatlanok.

A leginkább elterjedt spektrumkiértékelő programok a súlyozott legkisebb négyzetek módszerét alkalmazzák. A matematikában jó tulajdonságai miatt méltán népszerű maximum likelihood elv ritkán bár, de felbukkan néhány speciális kiértékelési probléma megoldásakor.

Az ez irányú kutatások iránti érdeklődés hiánya részben azzal magyarázható, hogy a gyakorlati spektroszkópiában előforduló problémák zöme a fenti módszerekkel is elfogadhatóan kezelhető. Vannak azonban olyan határterületek, pl. a kis beütésszámok tartománya, ahol a legkisebb négyzetek módszere nagyon nagy hibával szolgáltatja az eredményeket.

Ezekben az esetekben célszerű minden, a spektrumrészletben benne rejlő információt felhasználni a csúcsterület minél pontosabb meghatározása érdekében. 1994-ben Méray László kifejlesztett egy kiértékelő eljárást, amely később a teljes valószínűségi módszer nevet kapta. Ez az eljárás bizonyos szempontból rokonságot mutat a maximum likelihood módszerrel, meg azonban nem egyezik vele.

Matematikailag bizonyított, hogy a maximum likelihood módszer bizonyos szempontból a lehetséges legjobb becslési eljárás. Ezzel a ténnyel nem vitatkozunk, csak a szempont más egy kicsit a mi esetünkben. A dolgozat tárgya ennek megfelelően egyrészt a különböző, spektrumkiértékelésre alkalmas eljárások hatékonyságának vizsgálata a kis beütésszámok tartományában. (4. fejezet)

Doktori munkám másik fontos feladata a kimutatási határ, ill. az ezzel kapcsolatos analitikai határértékek meghatározása a teljes valószínűségi módszerrel. Miután a kimutatási határ függ a kiértékelő eljárástól, joggal reméltük az új módszer használatától a kimutatási határ csökkenését. Az ezzel kapcsolatos vizsgálatok a 3. fejezetben olvashatók.

Végül, de nem utolsósorban a módszer gyakorlati bevezetéséhez valódi spektrumkiértékelési feladatok elvégzése szükségeltetett. Két gyakorlati alkalmazást mutat be az 5. fejezet.

(Az 1. és 2. fejezet a téma irodalmi áttekintését tartalmazza. A 3. fejezetben leírtak Méray Lászlóval közösen végzett munkánk eredményeit tartalmazzák, a 4. és 5. fejezet pedig Révay Zsolt témavezetése alatt végzett saját munkám eredményeit foglalja össze.)



# 1. A felhasznált matematikai apparátus

## 1.1 Valószínűségszámítási alapok

Azonos körülmények között elvégzett fizikai mérések eredményei mindig valamilyen mértékű szórást mutatnak egy, számunkra ismeretlen érték körül. Ahhoz, hogy ezt az ismeretlen értéket – a mért fizikai mennyiség valódi értékét – meghatározhassuk, pontosan ismernünk kell mérési eredmények létrejöttében szerepet játszó véletlenfolyamatok természetét.

Jelen dolgozatban ennek a szokásosnál is nagyobb jelentősége van, lévén a dolgozat tárgya a nukleáris spektrumok tulajdonságait befolyásoló véletlenfolyamatok vizsgálata. Következzen ezért ebben az alfejezetben egy rövid összefoglalás a valószínűségszámításnak a dolgozat későbbi részeiben felhasznált eredményeiről, az 1.2. alfejezetben pedig a matematikai statisztika néhány eleméről.

Minden méréshez hozzárendelhető egy valószínűségi változó, melynek konkrét értékei a mérés lehetséges eredményei. A mérés típusától függően ezek az eredmények lehetnek diszkrét, vagy folytonos értékűek (az előbbire példa az adott időintervallumon belül bekövetkező radioaktív bomlások száma, míg az utóbbira a két bomlás között eltelt időintervallumok hossza). A valószínűségi változók ún. valószínűségeloszlást létesítenek a valós számok halmazán. Ezt az eloszlást diszkrét változó esetében általában lehetséges értékeivel, és ezek bekövetkezési valószínűségeivel adjuk meg. Folytonos változó eloszlása az eloszlásfüggvény, vagy a sűrűségfüggvény segítségével adható meg. Az eloszlásfüggvény diszkrét esetben is értelmezett.

Egy  $z$  valószínűségi változó eloszlásfüggvénye az a függvény, amely minden valós  $x$  számhoz hozzárendeli annak valószínűségét, hogy  $z$   $x$ -nél kisebb értéket vesz fel:

$$F(x) = P(z < x) \quad \forall x \in R. \quad (1.1)$$

Az eloszlásfüggvény monoton növekvő, és értékészlete a  $[0,1]$  intervallum.

Folytonos  $z$  valószínűségi változó sűrűségfüggvénye az az  $f$  függvény, amelyre teljesül, hogy

$$\int_{-\infty}^x f = F(x) \quad \forall x \in R. \quad (1.2)$$



Az eloszlásokat leggyakrabban a várható értékükkel és a szórásukkal jellemzik..

Egy  $z$  valószínűségi változó várható értéke diszkrét esetben:

$$E(z) = \sum_i x_i p_i , \quad (1.3)$$

ahol  $p_i$  annak valószínűsége, hogy a  $z$  változó  $x_i$  értéket vesz fel.

A várható érték folytonos esetben:

$$E(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx . \quad (1.4)$$

Végül a szórás definíciója:

$$\sigma = \sqrt{E\left([z - E(z)]^2\right)} . \quad (1.5)$$

Amennyiben az eloszlások ennél árnyaltabb jellemzésére van szükség, úgy képezhetjük különböző momentumaikat. Ezek közül a

$k$ -adik momentum:  $E(z^k)$  ill. a

$k$ -adik centrális momentum:  $E\left([z - E(z)]^k\right)$

bír a legnagyobb gyakorlati jelentőséggel, ahol  $k$  pozitív egész szám. Az első momentum a várható értékkel egyezik meg. Az első centrális momentum 0, a második centrális momentum pedig a szórás négyzete (más néven: variancia). A magasabb rendű momentumok is alkalmasak az eloszlás jellemzésére: pl. a harmadik centrális momentumnak és a szórás harmadik hatványának hányadosa az ún. ferdeségi együttható, mely az eloszlás aszimmetriájának mértékére jellemző.

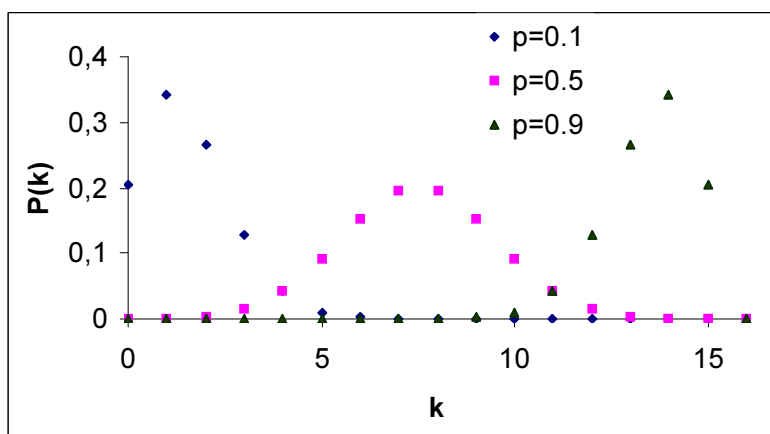
### 1.1.1 Néhány fontos valószínűségeloszlás

## A binomiális eloszlás

Ha egy kísérlet kétféle eredménnyel zárulhat (pl. egy radioaktív atom adott idő alatt elbomlik, vagy nem), akkor annak valószínűségét, hogy  $N$  számú kísérletet elvégezve a kísérlet  $k$  esetben az egyik,  $N - k$  esetben a másik eredményre vezetett, a binomiális eloszlás írja le. Mivel mind  $N$ , mind  $k$  nemnegatív egész számok, a binomiális eloszlás esetében diszkrét eloszlásról van szó. A binomiális eloszlás paramétere  $N$  mellett még  $p$  is, amely a kísérlet elvégzésekor az első eredmény bekövetkezésének valószínűségét adja meg. Ekkor természetesen a második kimenetel bekövetkezésnek valószínűsége  $1 - p$ . Ezek után annak valószínűsége, hogy  $N$  elvégzett kísérlet  $k$  esetben vezet az első eredményre:

$$P_B(N; k) = \frac{N!}{(N - k)!k!} p^k (1 - p)^{N - k}. \quad (1.6)$$

A binomiális eloszlás várható értéke:  $E = Np$ , szórása:  $\sigma = \sqrt{Np(1 - p)}$ . Az 1.1 ábrán a  $P(k)$  valószínűségek láthatók  $k$  függvényében  $N$  ugyanazon, és  $p$  három különböző értéke mellett.



1.1 ábra. A binomiális eloszlás

A  $P(k)$  függvény képe csak abban az esetben szimmetrikus, ha  $p = 0,5$ .

### A polinomiális eloszlás

A polinomiális eloszlás a binomiális eloszlás általánosítása kettőnél több lehetséges kimenetelű kísérletre. Itt a kísérlet minden egyes,  $m$  darab, egymást kizáró kimeneteléhez egy

$p_i$  ( $i = 1, 2, \dots, m$ ) valószínűség tartozik, melyeknek összege természetesen egy:  $\sum_{i=1}^m p_i = 1$ . A

polinomiális eloszlás  $m+1$  paraméterű, paraméterei:  $N, p_1, p_2, \dots, p_m$ . Annak valószínűsége, hogy az  $N$  elvégzett kísérlet  $k_1$  esetben vezetett az első kimenetelre,  $k_2$  esetben a másodikra, ...  $k_m$  esetben pedig az  $m$ -edikre:

$$P_{p_1, p_2, \dots, p_m}(N; k_1, k_2, \dots, k_m) = \frac{N!}{k_1! k_2! \dots k_m!} p_1^{k_1} p_2^{k_2} \dots p_m^{k_m}. \quad (1.7)$$

Teljesülnie kell még a  $\sum_{i=1}^m k_i = N$  feltételnek is.

A polinomiális eloszlás tulajdonságai a  $p_i$  paraméterektől függően széles skálán változhatnak. A  $P$  függvény is  $m$  változós ennél az eloszlásnál, ezért leírása meglehetősen bonyolult, használata pedig a gyakorlatban igen ritka. Azért került mégis bele ebbe a felsorolásba, mert a teljes valószínűségi módszerben központi szerepet kap.

### A Poisson-eloszlás

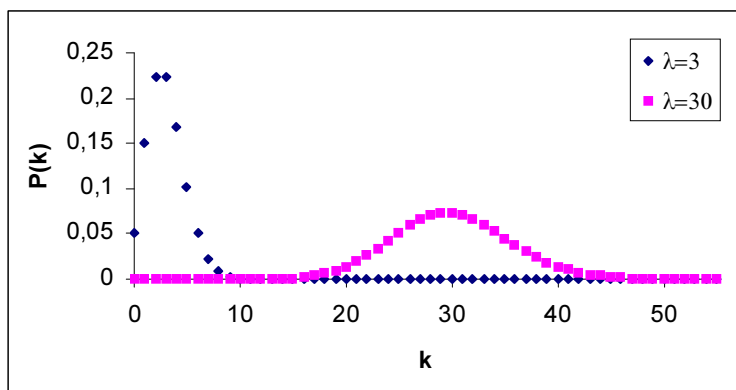
A Poisson-eloszlást a kis valószínűségű, vagy ritka események eloszlástörvényének is nevezik. Az előzőkhöz hasonlóan diszkrét eloszlás. A Poisson-eloszlás a binomiális eloszlás határeset, amennyiben a binomiális eloszlásból az  $N \rightarrow \infty, p \rightarrow 0$  határátmenetekkel kapható, melynek során azonban az  $Np$  szorzat értéke véges, konstans kell maradjon.  $\lambda = Np$  jelöléssel a binomiális eloszlást leíró valószínűségek a következő formában írhatók:

$$P_B(N; k) = \frac{\left(1 - \frac{1}{N}\right) \left(1 - \frac{2}{N}\right) \dots \left(1 - \frac{k-1}{N}\right)}{k!} \lambda^k \left(1 - \frac{\lambda}{N}\right)^{N-k}. \quad (1.8)$$

Ha  $\lambda$  rögzített és  $N \rightarrow \infty$ , akkor

$$P_B(N; k) \rightarrow P_P(\lambda; k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}, \quad (1.9)$$

amely nem más, mint a Poisson-eloszlást meghatározó kifejezés. A Poisson-eloszlás várható értéke:  $\lambda$ , szórása:  $\sqrt{\lambda}$ . Míg a binomiális eloszlás szórásnégyzete kisebb, mint a várható értéke (a  $p=0$  szélsőséges esetet kivéve), addig ez a két érték a Poisson-eloszlás esetében megegyezik.



1.2 ábra. A Poisson-eloszlás

Az ábra a  $P_P(k; \lambda)$  valószínűségeket mutatja  $k$  függvényében  $\lambda$  két értéke mellett. A  $P_P(\lambda; k)$  függvény képe  $\lambda$  kis értékei mellett aszimmetrikus,  $\lambda$  növekvő értékei mellett egyre jobb közelítéssel szimmetrikus.

### A Gauss-eloszlás

Az eddigiektől eltérően a Gauss-eloszlás folytonos eloszlás. A gyakorlatban legtöbbször használt, „legjobb” tulajdonságokkal bíró eloszlás. Jelentőségét leginkább a centrális határeloszlástételeknek köszönheti. Ezek a tételek azt fejezik ki, hogy nagyszámú, független valószínűségi változó összege közelítőleg Gauss-eloszlású, feltéve, hogy az összeg minden egyes tagja (nagy valószínűséggel) kicsi az összeghez képest. Az egyes valószínűségi változók eloszlásának ebből a szempontból nincs jelentősége.

A leggyakrabban említett példa ezzel kapcsolatban a mérési hibák eloszlása. A mérési hibák legtöbbször sok, egymástól független, véletlentől függő tényezőtől adódnak össze, így

eloszlásuk jól leírható Gauss-eloszlással. Természetesen vannak olyan esetek, amikor ez nem igaz – ezek az esetek nagy hangsúlyt fognak kapni a dolgozatban.

A Gauss-eloszlás sűrűségfüggvénye:

$$G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \quad (1.10)$$

$\mu$  és  $\sigma$  a Gauss-eloszlás paraméterei. A  $\mu$  paraméter a várható értékkel,  $\sigma$  a szórással egyezik meg. Ezek, az eddig felsorolt eloszlásokkal ellentétben egymástól függetlenül változhatnak. A Gauss-sűrűségfüggvénynek  $\mu$ -nél maximuma van, és a függvény az  $x=\mu$  tengelyre szimmetrikus. A  $\sigma$  paraméter a görbe „szélességével” áll kapcsolatban, a kb.  $2,355 \cdot \sigma$  a spektroszkópiában gyakran használt ún. félértékszélesség, azaz a görbének a maximumérték felénél vett szélessége.

Az eddig tárgyalt eloszlások mindegyike nemnegatív értékeket felvehető valószínűségi változók eloszlása volt. A Gauss eloszlás értelmezési tartománya a teljes valós számok halmaza. Ez a tény fontos lesz számunkra a továbbiakban, mert az általunk vizsgált mennyiségek (melyek eloszlását szokásosan Gauss-eloszlással közelítik) csak nemnegatív értékeket vehetnek fel, így, különösen, ha várható értékük nem sokkal nagyobb 0-nál, eloszlásukat a Gauss-eloszlás rosszul közelíti.

A Gauss-, vagy más néven normális eloszlás speciális esete a standard normális eloszlás, melynek várható értéke:  $\mu = 0$ , szórása:  $\sigma = 1$ . Egy  $x$ , Gauss-eloszlású valószínűségi változó ún. standardizáltja a  $x' = \frac{x - \mu}{\sigma}$  változó.

A statisztikai próbákkal foglalkozó fejezetben szó lesz a Gauss-eloszlás néhány további tulajdonságáról.

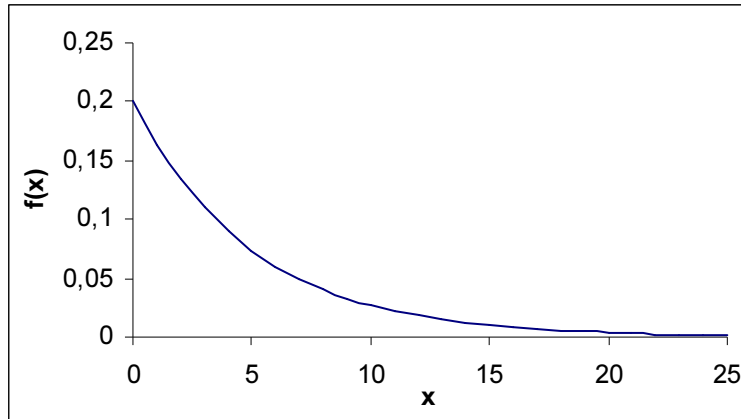
### *Az exponenciális eloszlás*

Ennek a folytonos eloszlásnak a tárgyalására azért kerül itt sor, mert egy radioaktív anyagban az egyes bomlások között eltelt időtartamok ilyen eloszlást követnek.

Az exponenciális eloszlás sűrűségfüggvénye:

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } x < 0 \\ \lambda e^{-\lambda x} & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}, \quad (1.11)$$

ahol  $\lambda > 0$  az exponenciális eloszlás paramétere. A sűrűségfüggvény képe a következő:



1.3 ábra. Az exponenciális eloszlás

A görbe  $\lambda = 0,2$  paraméterértékhez tartozik, amely a függvénygörbének a függőleges tengellyel való metszetéből is leolvasható. Az exponenciális eloszlás várható értéke és szórása egyaránt  $E = \sigma = \frac{1}{\lambda}$ .

Az exponenciális eloszlás eloszlásfüggvénye:

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f = \begin{cases} 0 & \text{ha } x < 0 \\ 1 - e^{-\lambda x} & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}, \quad (1.12)$$

$m$ -mel jelölve azt az  $x$  értéket, amelynél az eloszlásfüggvény értéke  $F(m) = \frac{1}{2}$ ;  $m$ -re a következő kifejezést kapjuk az eloszlásfüggvényből kiszámolva:  $m = \frac{1}{\lambda} \ln 2$ . Az exponenciális eloszlást a radioaktív atomok élettartamára alkalmazva  $m$  éppen a felezési idővel egyezik meg.

### 1.1.2 Valószínűségeloszlások közelíthetősége

A gyakorlatban gyakran felmerülő probléma, hogy milyen feltételek mellett közelíthető a binomiális eloszlás Poisson-eloszlással, ill. a Poisson-eloszlás Gauss-eloszlással. Az általunk a későbbiekben vizsgált fizikai folyamatok nagy része a binomiális eloszlással írható le egzakt módon. A binomiális eloszlás paraméterei,  $N$  és  $p$  azonban a valós esetekben általában nem, vagy csak nagyon hozzávetőlegesen határozhatók meg, ami a binomiális eloszlással való számolást nagyon megnehezíti, vagy lehetetlenné teszi. Az esetek zömében azonban jó közelítéssel teljesülnek az  $N \rightarrow \infty$  és a  $p \rightarrow \infty$  feltételek, amelyek lehetővé teszik a binomiális eloszlás Poisson-eloszlással való közelítését. (Ez olyannyira elterjedt, hogy a radioaktivitással foglalkozó szakkönyvek nagy része az adott idő alatt elbomlott atomok számát eleve Poisson-eloszlásúnak tekinti.)

A Poisson-eloszlásnak Gauss-eloszlással való közelíthetőségének kérdése a spektrumkiértékelés problémáinak kapcsán merül fel. A későbbiekben bemutatandó (és a gyakorlatban használt) kiértékelő eljárások túlnyomó többsége a csatornánkénti beütésszámokat Poisson-eloszlást közelítő Gauss-eloszlásúnak tekinti, matematikai modelljeik erre épülnek és más esetben nem is érvényesek. Így a csúcsterület becslésénél, és a csúcsterület becsült hibájának számításánál is Gauss-eloszlás használata a bevett gyakorlat.

A fenti közelítések feltételei azonban nem minden esetben teljesülnek. A következőkben megvizsgáljuk, hogy milyen feltételek mellett közelíthető a binomiális eloszlás Poisson-eloszlással, ill. milyen körülmények között alkalmazható a Poisson-eloszlásnak Gauss-eloszlással való közelítése. A binomiális eloszlás Poisson-eloszlással való közelíthetőségének feltétele, mint azt az 1.1.1 alfejezetben már láttuk,  $N \rightarrow \infty$  és  $p \rightarrow \infty$  egyidejű bekövetkezése, az  $Np$  szorzat 0-nál nagyobb, véges értéke mellett. Ekkor a binomiális eloszlást közelítő Poisson-eloszlás paramétere:  $\lambda = Np$ . (A binomiális eloszlás szórásnégyzete:  $\sigma^2 = Np(1-p)$  a fenti feltételek mellett tart  $Np$ -hez, mivel  $(1-p)$  tart 1-hez. Így teljesül a Poisson-eloszlásra jellemző  $E = \sigma^2$  összefüggés is.)

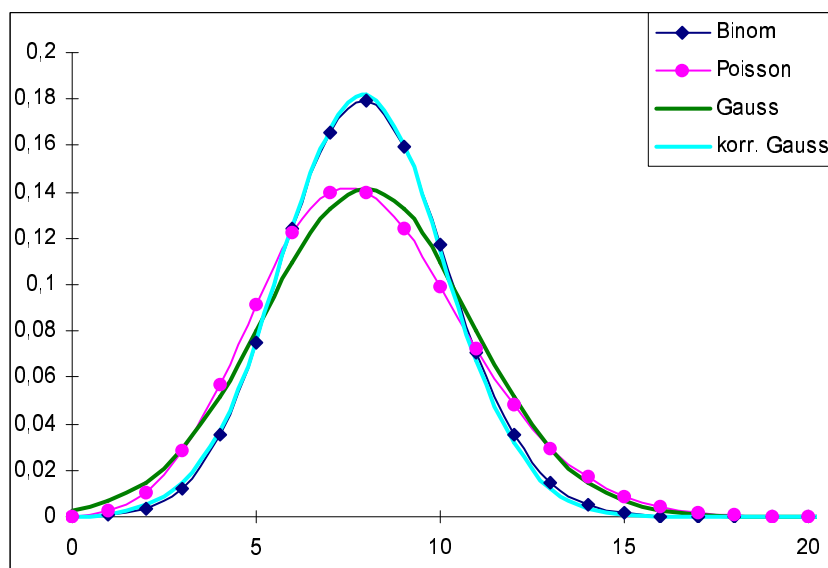
Poisson-eloszlásnak Gauss-eloszlással való közelíthetőségének feltétele  $\lambda$  "nagy" értéke. A nukleáris spektrometriai szakirodalom a Gauss-közelíthetőség alsó határára változó értékeket ad:  $\lambda=5$  [LYO86],  $\lambda=20$  [LEO87], [KNO89],  $\lambda=25$  [GIL95]. (A  $\lambda=20$  érték egy 10 csatorna szélességű csúcsnál min. 200-as össz-beütésszámot jelent. Ennek ellenére alacsony háttéren

ülő, kis beütésszámú csúcsok esetén ennél jóval kisebb össz-beütésszám mellett is gyakran használják a Gauss-eloszlást feltételező  $\chi^2$ -módszert.)

A Poisson-eloszlást közelítő Gauss-eloszlás speciális, mert az általános Gauss-eloszlással ellentétben két paramétere,  $\mu$  és  $\sigma$  nem függetlenek egymástól, hanem mint a Poisson-eloszlásnál, teljesülnie kell a  $\mu = \sigma^2$  összefüggésnek.

Létezik egy másik lehetőség is a binomiális eloszlásnak közvetlenül Gauss-eloszlással való közelítésére, mely az  $Np$  szorzat kis értékei esetén ad jó közelítést a binomiális eloszlásra [JÁN68]. Itt a közelítő Gauss-eloszlás várható értéke  $\mu = Np + p - 1/2$ , szórása változatlanul  $\sigma = \sqrt{Np(1-p)}$ .

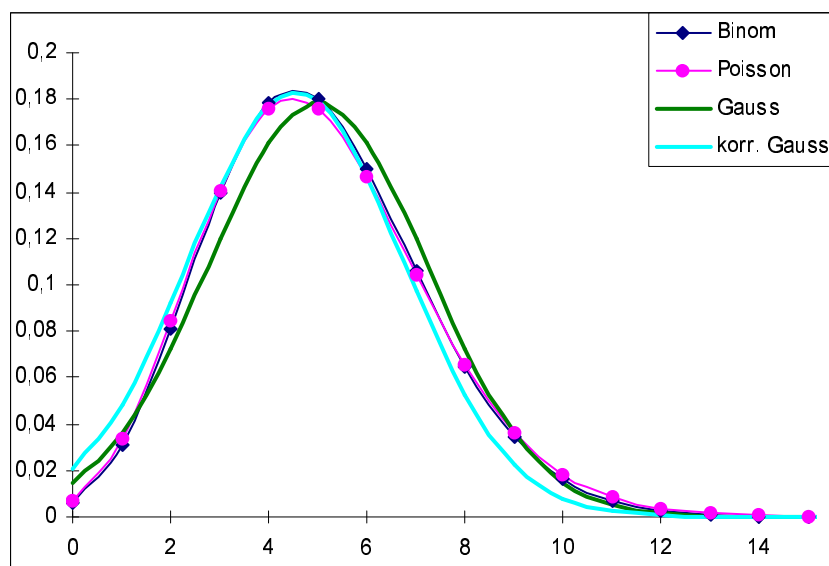
Az alábbi három ábrán a fent felsorolt négy valószínűségeloszlás sűrűségfüggvénye, ill. a diszkrét eloszlásoknál a megfelelő valószínűségértékek láthatók  $N$  és  $p$  különböző értékei mellett. "Gauss-I" az  $\mu_1=Np$  várható értékű Gauss-eloszlást jelöli, "Gauss-II" pedig az  $\mu_2 = Np + p - 1/2$  várható értékűt.



1.4 ábra. Az eloszlások közelíthetősége.  $N=20$ ,  $p=0,4$

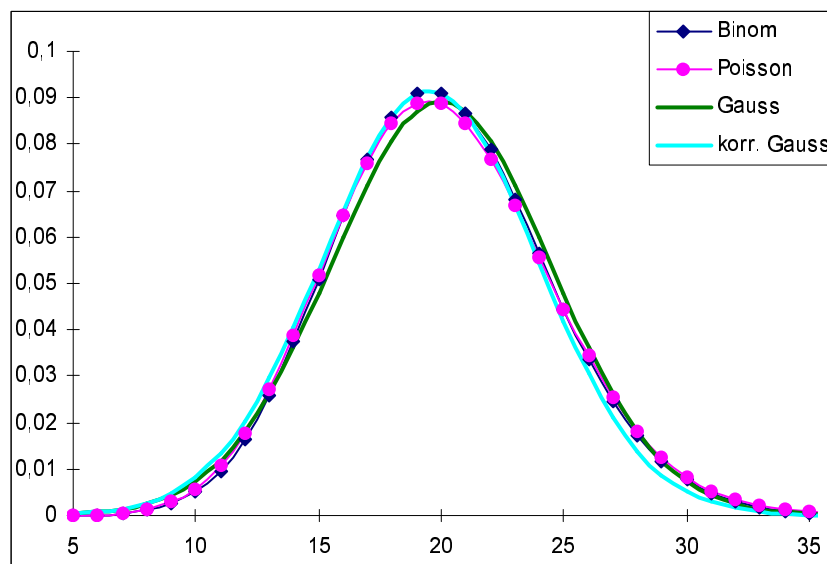
Az 1.4 ábrán  $N$  viszonylag kicsi ( $N=20$ ),  $p$  viszonylag nagy ( $p=0,4$ ). Ebben az esetben csak a Gauss-II-vel jelölt sűrűségfüggvény mutat jó egyezést a binomiális eloszláshoz tartozó valószínűségértékekkel.





1.5. ábra. Az eloszlások közelíthetősége.  $N=100$ ,  $p=0,05$

Az 1.5 ábrán  $N=100$ ,  $p=0,05$ .  $N$  már elegendően nagy,  $p$  pedig elegendően kicsi a binomiális és Poisson-eloszlások jó egyezéséhez, a Poisson-eloszlás Gauss-közeliíthetőségéhez viszont még nem.



1.6 ábra. Az eloszlások közelíthetősége.  $N=400$ ,  $p=0,05$

$N=400$  és  $p=0,05$  (1.6 ábra)  $\lambda = \mu = 20$  az a minimális paraméterérték, amelynél a Poisson-eloszlás Gauss-eloszlással való közelítése már elfogadható, bár az egyezés még korántsem tökéletes.

### 1.1.3 A Bayes-tétel és az inverz valószínűség

A Bayes-tétel a valószínűségszámítás egyik legtöbb vitát okozó tétele. Nem mintha a tétel maga nem lenne matematikailag kifogástalan, hanem alkalmazhatóságának köre az, ami a vitákat kiváltja.

A Bayes-tétellel kapcsolatban, melyet az „okok valószínűségének tétele”-ként is említenek, magának a tétel kitalálójának is lehettek fenntartásai, hiszen haláláig nem közölte le eredményét. Halála után Price publikálta a tételt. [FIS30]. Manapság a Bayes-elmélet reneszánszát éli, és legalább annyi követője akad, amennyi ellenzője.

A Bayes-tétel matematikai megfogalmazásához szükséges valószínűségszámítási alapfogalmak definiálására itt nincs sem lehetőség, sem szükség: ezek minden valószínűségszámítás-könyvben szerepelnek. Magát a tételt talán mégis érdemes itt leírni:

Amennyiben  $B_1, B_2, \dots, B_n$  teljes eseményrendszer, az  $A$  esemény valószínűsége pedig  $P(A) > 0$ , akkor a  $B_k$  eseménynek az  $A$  eseményre vonatkozó feltételes valószínűsége a következő módon számítható ki:

$$P(B_k | A) = \frac{P(A | B_k)P(B_k)}{\sum_{j=1}^n P(A | B_j)P(B_j)}, \quad (1.13)$$

ahol a  $P(X | Y)$  típusú valószínűségek az  $X$  eseménynek  $Y$ -ra vonatkozó feltételes valószínűségét jelölik.

A tétellel kapcsolatos viták kiváltója a  $B_1, B_2, \dots, B_n$  eseményrendszer mibenléte, ill. a  $P(B_k)$  valószínűségek meghatározási módja. Amennyiben ezen valószínűségeket nem ismerve az eseményrendszer eseményeit egyformán valószínűeknek tekintjük, a  $P(B_k|A)$  értékeket inverz valószínűségeknek nevezzük [FIS30]. Ennél még tovább mehetünk: a  $B_k$  eseményeknek nem is okvetlenül szükséges véletlen eseményeknek lenniük: elég, ha egy számunkra ismeretlen értékű paraméter lehetséges értékeit jelentik. Ez a megfogalmazás pedig már a valószínűségszámítás alapjait: a valószínűség definícióját érinti.

A gyakorlati tudományokban sokszor felmerülő probléma egy olyan ismeretlen paraméter értékének meghatározása, amely valamilyen, vele összefüggő, véletlen ingadozásokat mutató mért értékekből határozható meg. Az ilyen problémák kezelését nagyban megkönnyíti az inverz valószínűség használata. A fizikusok ezzel a lehetőséggel sokszor élnek is, méghozzá gyakran az inverz szó elhagyásával, az eredményeket egyszerűen valószínűségnek nevezve [ORE82]. Ez a matematikusok számára elfogadhatatlan megfogalmazás az esetek egy részében csak nevezéktani/filozófiai probléma, az eredmények helyességét nem érinti.

Jelen dolgozatban az inverz valószínűséget felhasználó számítások csak a 3.1 alfejezet számításaiban szerepelnek.

## 1.2 Statisztikai alapok

A matematikai statisztika egyik feladata, hogy egy statisztikai mintából (valamely mérés, megfigyelés véges számú eredményéből) a vizsgált valószínűségi változó eloszlására, és az eloszlás paramétereire következtessen.

Az elméleti eloszlásfüggvényre vonatkozóan leginkább a minta empirikus eloszlásfüggvénye alapján következtethetünk. Ennek  $x$  helyen felvett értéke nem más, mint az  $x$ -nél kisebb mintaelemek száma, osztva az összes mintaelemek számával; azaz az  $x$ -nél kisebb mintaelemek relatív gyakorisága. Az empirikus eloszlásfüggvény a minta elemszámának növekedésével az elméleti eloszlásfüggvényhez konvergál. Folytonos eloszlású minta esetén érdemes az ún. sűrűség-hisztogramot felvenni: a legkisebb és legnagyobb mintaelem által meghatározott intervallumot egyenlő részekre felosztva az egyes részintervallumokba eső mintaelemek számát ábrázolni úgy, hogy a végeredményül kapott hisztogram területe 1 legyen. Így az elméleti sűrűségfüggvénnyel összehasonlítható grafikont kapunk.

Az elméleti várható érték közelítésére alkalmas a mintaelemek átlaga, a szórásnégyzet közelítésére pedig a mintaelemek átlagtól való eltéréseinek négyzetösszege, osztva a mintaelemek számával.

Mérés(ek) végzésekor célunk az elméleti eloszlás valamely paraméterének, vagy ezzel függvénykapcsolatban levő más paramétereknek a meghatározása. Azonos körülmények között végzett mérések eredményei is csak ritkán egyeznek meg egymással, általában valamilyen, számunkra ismeretlen érték körül szórnak. A mérések megfelelő kivitelezése

mellett ez az ismeretlen érték a vizsgált paraméter valódi értékével egyezik meg. Az ilyen jellegű problémákkal a matematikai statisztika paraméterbecslés fejezete foglalkozik. A paraméter megbecslése mellett tudnunk kell azt is, hogy a kapott eredmény milyen megbízhatósággal egyezik meg az ismeretlen, valódi értékkel, azaz a paraméter statisztikus hibáját is meg kell becsülnünk.

A matematikai statisztikának a nukleáris spektroszkópiában felhasznált ilyen jellegű eredményeiről következik egy rövid összefoglalás.

### 1.2.1 A legkisebb négyzetek módszere

A legkisebb négyzetek módszere mért értékekhez valamilyen típusú függvény illesztésére, ill. az illesztőfüggvény optimális alakjának megkeresésére alkalmas.

Mérési eredmények számának valamilyen  $x$  változó szerinti eloszlását vizsgáljuk (pl. egy detektorba beérkezett részecskék energia szerinti eloszlását). Ezt megtehetjük úgy, hogy az  $x$  változó lehetséges értékeinek tartományát  $k$  darab egyenlő részre felosztva megszámloljuk az egyes intervallumokba eső események számát (pl. egy adott energiaintervallumba eső energiájú detektált részecskék számát). Eredményül a  $k$  darab intervallumban  $y_1, y_2, \dots, y_k$  darab eseményt regisztrálunk. Ehhez a hisztogramhoz próbálunk meg egy  $f(x; a_1, a_2, \dots, a_n)$  függvényt illeszteni, ahol  $a_1, a_2, \dots, a_n$  a függvény meghatározandó paraméterei. A módszer használhatóságának feltétele, hogy sem az intervallumok  $k$  száma, sem az intervallumokba eső események  $y_i$  száma nem lehet túlságosan kicsi. (Ez a feltétel problémát okozhat a módszer spektroszkópiai alkalmazásánál, ezért ott részletesebben szó lesz róla). Amennyiben ezek a feltételek teljesülnek, képezzük a

$$S = \sum_{i=1}^k \frac{(y_i - f(x_i))^2}{\sigma_i^2} \quad (1.14)$$

összeget. Bár  $f$  általában folytonos függvény, itt csak bizonyos diszkrét értékeit használjuk fel;  $x_i$  az intervallumokra osztott  $x$  skála alkalmasan megválasztott értékeit jelenti: pl. az intervallumok közepét.  $\sigma_i$  valamilyen statisztikus hibát jelöl: precíz leírás esetén ez az elméleti eloszlás szórása, gyakorlatban azonban általában jelentősen leegyszerűsíti a további

számolást, ha  $\sigma_i$ -t a mért értékek szórásának tekintjük. (Egész pontosan az itt ismertett eljárás a súlyozott legkisebb négyzetek módszere,  $1/\sigma$  súlyfaktorok használatával.)

Az  $a_1, a_2, \dots, a_n$  paraméterek azon értékei lesznek a legmegfelelőbbek, amelyek mellett az  $S$  összeg minimális.

Amennyiben a mért értékeket Gauss-eloszlásúnak tekintjük, lehetőség van információt szerezni az illesztés jóságáról is. Ebben az esetben ugyanis az  $S$  összeg  $\chi^2$ -eloszlású valószínűségi változó (gyakran szokták emiatt eleve  $\chi^2$ -tel jelölni). A  $\chi^2$ -eloszlás táblázataiból kikereshető annak valószínűsége, hogy  $\chi^2$  nagyobb, vagy egyenlő a minimális  $S$  értéknél.

$\chi^2$ -eloszlású valószínűségi változó definíció szerint véges számú standard normális eloszlású valószínűségi változó négyzetösszege. A valószínűségi változók  $\nu$  számát a  $\chi^2$ -eloszlás szabadsági fokának nevezik. Amennyiben az  $y_i$  mért értékek normális eloszlást követnek  $f(x_i)$

várható értékkel és  $\sigma_i$  szórással, a  $\frac{y_i - f(x_i)}{\sigma_i}$  kifejezés valóban  $y_i$  standardizáltja. A  $\nu$

szabadsági fokú  $\chi^2$ -eloszlás sűrűségfüggvénye:

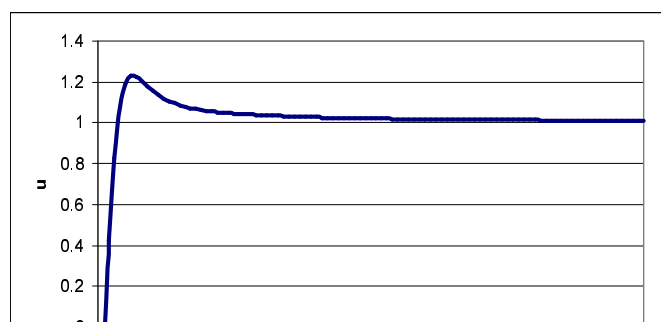
$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } x < 0 \\ \frac{x^{\frac{\nu}{2}-1} e^{-\frac{x}{2}}}{2^{\frac{\nu}{2}} \Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}, \quad (1.15)$$

ahol  $\Gamma$  a teljes gamma-függvény ( $\Gamma(\alpha) = \int_0^{\infty} u^{\alpha-1} e^{-u} du$   $\alpha > 0$ ). Az  $\nu$  szabadsági fokú  $\chi^2$ -eloszlás

várható értéke  $\nu$ , szórása  $\sqrt{2\nu}$ . A gyakorlatban inkább az ú.n. redukált  $\chi^2$  használatos, mely a

$\frac{\chi^2}{\nu}$  valószínűségi változó eloszlása. Ennek várható értéke 1, szórása  $\sqrt{\frac{2}{\nu}}$ .

Itt érdemes megjegyezni, hogy ha az 1.14 összefüggésben a mért értékek hibájának reciprokával súlyozunk, az Poisson-eloszlást követő mérési eredmények esetén szisztematikus hibához vezet.



1.7 ábra. A súlyozott legkisebb négyzetek módszerével kapott eredmény eltérése a várható értéktől a várható érték függvényében

Tételezzük fel, hogy az 1.14-ben szereplő  $f(x)$  függvény konstans:  $f(x)=A$ . Ekkor az  $y_i$  mérési eredmények az  $E(y)$  várható érték körül szórnak. Amennyiben egy mérési eredmény fölfelé tér el a várható értéktől, akkor a kelleténél kisebb, ha lefelé, akkor a kelleténél nagyobb súlyt kap a számításban. Ez azt eredményezi, hogy 1.14 az optimumban alulbecsli  $A$ -t egy, az  $E(y)$ -től függő  $z$  értékkel (1.7 ábra).\*

### 1.2.2 A maximum likelihood módszer

A maximum likelihood (magyarul: a legnagyobb valószínűség) módszer a leggyakrabban használt paraméterbecslési módszerek egyike. Bevezetése R. A. Fisher nevéhez fűződik [FIS21]. A legkisebb négyzetek módszeréhez hasonlóan ez is azonos, ismert típusú eloszlású  $y_1, y_2, \dots, y_k$  (mért) értékekből álló minta alapján ad becslést az eloszlás ismeretlen paraméterére (vagy paramétereire). Spektroszkópiai alkalmazási lehetőségét gyakran említi a szakirodalom, a gyakorlatban mégis nagyon ritkán bukkan fel. Ennek oka valószínűleg az, hogy a mért értékek Gauss-eloszlása esetén a maximum likelihood módszer a legkisebb négyzetek módszerével egyező eredményeket ad, ettől eltérő eloszlás feltételezése pedig a paraméterek hibabecslését annyira bonyolulttá (vagy pontatlanná) teszi, hogy emiatt ez a megoldás kevésbé népszerű. A módszer lényege röviden a következő:

Képezzük az

$$L(y_1, y_2, \dots, y_k; a_1, a_2, \dots, a_n) = f(y_1; a_1, a_2, \dots, a_n) f(y_2; a_1, a_2, \dots, a_n) \dots f(y_k; a_1, a_2, \dots, a_n), \quad (1.15)$$

ún. likelihood-függvényt, ahol a szorzat tényezői a mintaelemek valószínűségi sűrűségfüggvényei. Mivel a mintaelemek függetlenek és azonos eloszlásúak, ezért  $L(y_1, y_2, \dots, y_k; a_1, a_2, \dots, a_n)$  a mintaelemek együttes sűrűségfüggvénye.  $y_1, y_2, \dots, y_k$  helyére a mintaelemek aktuális értékét írva a likelihood-függvény csak az  $a_1, a_2, \dots, a_n$  ismeretlen paraméterektől fog függeni. Az  $a_1, a_2, \dots, a_n$  paraméterek maximum likelihood becslésének a paraméterek azon értékeit nevezzük, amelyek mellett a likelihood-függvény értéke maximális. Általában technikailag egyszerűbb a likelihood-függvény logaritmusának maximumát keresni.

A későbbiek miatt talán érdemes pár szót ejteni a *likelihood* szó jelentéséről. Magyarul a *valószínűség* szót használjuk erre is, akárcsak a *probability* szóra. A maximum likelihood módszer kidolgozója azonban nem véletlenül használt a matematikai értelmű valószínűségtől (*probability*) különböző, jelentésében mégis hasonló szót. A likelihood-függvény értékei ugyanis nem valószínűségek matematikai értelemben, mivel a paraméter, amely a likelihood-függvény változójaként szerepel, nem valószínűségi változó, hanem csak számunkra ismeretlen állandó. Így a valószínűség ma elfogadott matematikai definíciója szerint legfeljebb a 0 vagy az 1 valószínűség rendelhető hozzá. A szó nem matematikai értelmében azonban beszélhetünk arról, hogy a paraméter mely értéke a legvalószínűbb, a rendelkezésünkre álló adatok alapján. Ilyen értelmű valószínűséget fejez ki a *likelihood* szó.

A módszer „életútjának” korai szakaszában több kutatóban felmerült a „likelihood” és az inverz valószínűség fogalmának esetleges egyezése. Fisher több cikkében [FIS30], [FIS32] bebizonyította, hogy a két fogalomnak sem matematikai, sem filozófiai szempontból nincs köze egymáshoz.

A legkisebb négyzetek módszerénél az  $S$  függvény minimumának, a maximum likelihood módszernél az  $\ln L$  függvény maximumának, és így a paraméterek optimális értékének megkeresése a függvényeknek a meghatározandó paraméterek szerinti parciális deriváltjai zérushelyének megkeresésével történik. Ez egy  $n$  egyenletből álló egyenletrendszerre vezet ( $n$  az ismeretlen paraméterek száma), mely csak bizonyos esetekben oldható meg analitikus úton. (A legkisebb négyzetek módszerének konkrét alkalmazásánál erre a ritka esetre láthatunk majd példát). Megoldásukhoz általában numerikus módszereket használnak. Ezek közül a

---

\* A legkisebb négyzetek módszerének szisztematikus hibájával kapcsolatos saját eredményeit (az ábrát is beleértve) Révay Zsolt bocsátotta rendelkezésemre.

leginkább elterjedtek a szimplex-módszer, és a Newton-módszer. Az előbbi geometriai jellegű módon, ún.  $n$ -szimplexek (a legegyszerűbb  $n$ -dimenziós poliéderek) segítségével, a szimplex csúcán felvett függvényértékek összehasonlításával keresi az  $n$ -változós függvény minimumát. Előnye, hogy használhatósága nem függ jelentősen a minimalizálandó függvény típusától, hátránya, hogy viszonylag lassan konvergál [LEO87]. A Newton-módszer szerint eljárva a függvényt, melynek szélsőértékét keressük, Taylor-sorba fejtjük a második tagig  $x_0$  pont, ill.  $n$  dimenzióban  $\underline{x}_0$  vektor körül. Az  $n$ -dimenziós sorfejtés eredménye

$$f(\underline{x}) \approx f(\underline{x}_0) + \mathbf{g}^T (\underline{x} - \underline{x}_0) + \frac{1}{2} (\underline{x} - \underline{x}_0)^T H (\underline{x} - \underline{x}_0), \quad (1.16)$$

ahol  $\mathbf{g}$  az  $\frac{\partial f}{\partial x_i}$  első parciális deriváltak vektora,  $H$  pedig a  $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$  második deriváltak mátrixa.

$H$ -t Hess-mátrixnak is nevezik. A módszer tulajdonképpen egy  $n$ -dimenziós parabolával közelíti a függvényt, melynek minimumhelye a következő összefüggés alapján számítható:

$$\underline{x}_{i+1} = \underline{x}_i - H^{-1} \underline{g}. \quad (1.17)$$

Ez még nem az  $f$  függvény minimuma, de  $\underline{x}_i$  helyére  $\underline{x}_{i+1}$ -et helyettesítve az eljárás tovább folytatható, és viszonylag gyorsan elérhető vele a függvény tényleges minimuma. (A módszer hátránya, hogy csak  $H$  pozitív definitisége esetén használható, amely probléma kiküszöbölésére azonban különböző módszerek léteznek.)

A Hess-mátrix inverze mind a maximum likelihood, mind a legkisebb négyzetek módszere esetén alkalmas a paraméterek becslt hibáinak meghatározására. A maximum likelihood módszer esetén a mátrix inverzének (-1)-szerese, a legkisebb négyzetek módszere esetén a mátrix inverzének (1/2)-szerese tartalmazza a paraméterek becslt hibáit oly módon, hogy a mátrix diagonál-elemei a megfelelő paraméterek szórásnégyzetével, a diagonálison kívüli elemei pedig a paraméterek kovarianciájával egyeznek meg. Megjegyzendő azonban, hogy a hibabecslésnek ez a módja csak Gauss-eloszlás esetén ad pontos eredményt, ettől eltérő esetben a hibabecslésre csak közelítő eljárások léteznek.



### 1.2.3 $A$ hibabecsléssel kapcsolatos további megfontolások

Tegyük fel, hogy a fent leírt módszerek valamelyikével meghatározva egy paraméter becslt értékét, arra az  $A$ , hibájára pedig a  $\sigma(A)$  számot kaptuk. (Ennek szokásos írásmódja  $A \pm \sigma(A)$ ). Tegyük fel továbbá, hogy a paraméter – számunkra ismeretlen – értéke  $A_0$ . A paraméter Gauss-eloszlása esetén annak valószínűsége, hogy a becslés eredménye a valódi  $A_0$  érték  $\pm\sigma$  környezetébe esik, egyenlő az (1-re normált) Gauss-görbének az  $A_0 - \sigma$ -hoz és  $A_0 + \sigma$ -hoz tartozó pontjai közötti görbe alatti területével. Ez a valószínűség kb. 0,68, tehát:

$$p(A_0 - \sigma \leq A \leq A_0 + \sigma) \approx 0,68. \quad (1.18)$$

Mivel azonban számunkra a paraméter becslt értéke ismert, valódi értéke pedig ismeretlen, a fenti egyenlőtlenséget célszerű átalakítani:

$$p(A - \sigma \leq A_0 \leq A + \sigma) \approx 0,68. \quad (1.19)$$

Ennek az egyenlőtlenségnek a jelentése: a fenti intervallum két végpontja tekinthető valószínűségi változónak,  $p$  pedig annak valószínűségét adja meg, hogy az intervallum lefedi a paraméter valódi értékét. Az intervallumot szokás konfidencia-intervallumnak, a  $p$  valószínűséget pedig konfidencia-szintnek nevezni. Tetszőleges konfidencia-szinthez meghatározható konfidencia-intervallum a Gauss-eloszlás táblázatának segítségével, a gyakorlatban azonban a becslt érték körüli  $\pm\sigma$ ,  $\pm 2\sigma$ , ill.  $\pm 3\sigma$  intervallumok használatosak, melyek rendre kb. 0,68, 0,95 ill. 0,997-es konfidencia-szintekhez tartoznak.

A paraméter normálistól különböző eloszlása esetén mind a paraméterek hibájának, mind a konfidencia-intervallumoknak a meghatározása nehézségekbe ütközik. A nehézség oka elsősorban az eloszlás sűrűségfüggvényének aszimmetriája.

Gyakorlati alkalmazások során előfordul, hogy valamely paraméterhez nem szükséges két végponttal rendelkező konfidencia-intervallumot megadni, elegendő egy felső (ritkábban alsó) határ megállapítása. Ennek elve nem különbözik a kétoldalú konfidencia-intervallumok meghatározási módjától: a konfidencia-szintet a felső határ által a Gauss-görbéből levágott („felső”) rész görbe alatti területe határozza meg.

### 1.3 A radioaktív bomlás statisztikája

Radioaktív atomok bomlása a véletlen események egyik klasszikus példája. Egy radioaktív anyagban adott idő alatt elbomlott atomok száma, vagy a bomlások közötti időintervallumok hossza egyaránt valamilyen eloszlást követő valószínűségi változó. Ezeket az eloszlásokat vizsgáljuk meg közelebbről a következőkben.

A radioaktív bomlás törvényét először kísérleti megfigyelésekre támaszkodva állította fel Rutherford és Soddy. Eszerint egy radioaktív anyagban a  $dt$  idő alatt bekövetkező bomlások  $dN$  száma arányos a radioaktív atomok pillanatnyi  $N$  számával:

$$A \equiv -\frac{dN}{dt} = \lambda \cdot N . \quad (1.20)$$

$A$  itt az aktivitás, azaz az időegység alatt bekövetkező bomlások száma,  $\lambda$  pedig a folyamatra jellemző bomlási állandó, melynek jelentése egy bizonyos atommag időegység alatt bekövetkező elbomlásának valószínűsége. A bomlási törvény integrális alakja:

$$N(t) = N(0) \cdot e^{-\lambda t} , \quad (1.21)$$

ahol  $N(0)$  a  $t=0$ -nál jelenlévő radioaktív atommagok száma. A bomlási törvény statisztikus jellegű: a  $t$  időpontban még el nem bomlott atommagok száma  $N(t)$ , mint várható érték körül ingadozik.

A bomlási törvény az adott pillanatbeli aktivitás és az abban a pillanatban jelenlévő el nem bomlott atommagok száma közti lineáris összefüggés miatt az aktivitásra is felírható:

$$A = A_0 e^{-\lambda t} . \quad (1.22)$$

Megemlítendő még egy, a radioaktív anyagok jellemzésére használt mennyiség, a felezési idő. Ez alatt az a  $T$  időtartam értendő, amely alatt az atommagok (átlagosan) fele elbomlik:

$$\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\lambda T} . \quad (1.23)$$

A radioaktív bomlástörvény bevezethető matematikai megfontolások alapján is. Ennek ismertetését Jánossy Lajos alapvető munkájára [JÁN68] támaszkodva tesszük meg. A törvény bevezetéséhez mindössze két előzetes feltevésre van szükség:

1. A vizsgált radioaktív sugárforrás minden atomja azonos természetű (azonos bomlási állandó jellemző rájuk)
2. Az egyes bomlások egymástól függetlenek.

Először annak valószínűségét ( $p(t)$ ) határozzuk meg, hogy  $t$  idő alatt egyetlen bomlás sem következik be. A  $p(t)$  függvény meghatározása céljából a  $t$  időintervallumot két részre osztjuk:  $t = t_1 + t_2$ . Ekkor  $p(t_1)$  ill.  $p(t_2)$  annak valószínűsége, hogy  $t_1$  ill.  $t_2$  idő alatt nem következett be bomlás. A fenti 2. feltétel miatt

$$p(t) = p(t_1 + t_2) = p(t_1) \cdot p(t_2). \quad (1.24)$$

Ennek a függvényegyenletnek reguláris megoldása a

$$p(t) = e^{-\alpha t} \quad (1.25)$$

függvény, ahol  $\alpha \geq 0$  állandó.

Hasonló függvény írja le annak valószínűségét is, hogy egy bizonyos atommag nem bomlik el a  $[0; t]$  időintervallumban. Ennek levezetéséhez a feltételes valószínűségekre vonatkozó szabályt hívhatjuk segítségül. Azon feltétel mellett, hogy egy bizonyos atommag a  $t_1 < t$  időpontban még nem bomlott el, annak valószínűsége, hogy  $t$  ideig sem bomlik el:

$$p(t | t_1) = \frac{p(t)}{p(t_1)}, \quad (1.26)$$

ahol  $p(t)$ , ill.  $p(t_1)$  jelöli a bomlás be nem következését az adott ideig. Mivel egy atommag adott időtartam alatt bekövetkező bomlásának valószínűsége független a részecske „előéletétől”, a  $p(t | t_1)$  feltételes valószínűség csak a  $t - t_1$  időintervallum hosszától függhet:

$$p(t | t_1) = p(t - t_1). \quad (1.27)$$

Ezért az 1.26 egyenlet alapján:

$$p(t) = p(t - t_1)p(t_1). \quad (1.28)$$

Az ilyen típusú függvényegyenlet megoldása, hasonlóan az előzőekben leírtakhoz:

$$P(t) = e^{-\lambda t} \quad (\lambda \geq 0) \quad (1.29)$$

alakú. Mivel ez a megfigyelt atommag  $t$  időtartam alatti el nem bomlásának valószínűsége, az elbomlás valószínűsége:

$$\bar{P}(t) = 1 - P(t) = 1 - e^{-\lambda t}. \quad (1.30)$$

Ennek az összefüggésnek a segítségével már elméleti úton is levezethetjük a bomlástörvényt. Ehhez tekintsük annak valószínűségét, hogy a  $[0, t]$  időintervallumban  $k$  darab atommag bomlott el, és így a  $t$  időpontban  $N(t) = N_0 - k$  elbomlatlan atommag van jelen. Ez a valószínűség a binomiális eloszlással írható le [Ján68]:

$$p_B(N_0; k) = \binom{N_0}{k} (1 - e^{-\lambda t})^k e^{-(N_0 - k)\lambda t}. \quad (1.31)$$

Ennek az eloszlásnak a maximuma  $N(t)$  várható értékének közelében van, ezért nagyon valószínű, hogy

$$N(t) \approx \langle N(t) \rangle = N_0 e^{-\lambda t}. \quad (1.32)$$

Eszerint a  $\lambda$  állandó jelölése jogos, hiszen fizikai jelentésében éppen a bomlási állandónak felel meg.

Az eddigiekben egy radioaktív sugárforrás által kibocsátott részecskesugárzás statisztikus tulajdonságait vizsgáltuk. A gyakorlatban ezt a sugárzást valamilyen detektor segítségével tesszük észlelhetővé. A forrás által kibocsátott részecskéknek minden esetben van egy hányada, amely nem kerül megszámlálásra a detektorban. Mivel a számunkra elérhető információt a detektált részecskék száma (a továbbiakban: beütésszám) jelenti, meg kell vizsgálni, mi jellemző pl. az adott idő alatt detektált részecskék számának eloszlására. A különbség az előzőekhez képest nem számottevő. Bevezetve az  $\varepsilon = \frac{\text{detektált részecskék száma}}{\text{a forrás által kibocsátott részecskék száma}}$  mennyiséget (a detektálási hatásfokot), annak valószínűsége, hogy a  $[0, t]$  időintervallumban egy atommag elbomoljon, és az ezáltal keletkezett részecske detektálásra kerüljön, az 1.29 egyenletben megadott valószínűségnek, és a detektálási hatásfoknak a szorzata. Így az adott idő alatt detektált részecskék száma is binomiális eloszlást követ, melynek  $p$  paramétere:  $p = (1 - e^{-\lambda t}) \cdot \varepsilon$ . Mivel a hatásfok minden esetben 1-nél kisebb szám – sőt, az esetek nagy részében 1-nél jóval kisebb – ezért a detektált részecskék számának eloszlása az esetek nagyobb részében közelíthető Poisson-eloszlással, mint a forrás által kibocsátott részecskék száma.

Az eddigiekben eredendően radioaktív anyagok által kibocsátott részecskesugárzás vizsgálatáról volt szó. A spektroszkópai gyakorlatban nagy szerepe van azoknak az eljárásoknak is, amelyek során különböző – esetleg eredendően nem radioaktív – anyagokat aktiválnak valamilyen típusú sugárzással, amely anyagok ennek hatására rájuk jellemző energiájú részecskesugárzást bocsátanak ki. (A kibocsátott sugárzás típusa természetesen a gerjesztő sugárzás típusától és energiájától függ.) Ez a kibocsátott sugárzás statisztikai szempontból nem különbözik az előbbieken tárgyalt, radioaktív atommagok bomlása során kibocsátott sugárzástól. Az állandó aktiváló sugárzásnak kitett anyag által kibocsátott sugárzás egy nagyon hosszú felezési idejű, nagy mennyiségű radioaktív anyag bomlásából származó sugárzással modellezhető. Ebben az esetben az aktivitás állandónak tekinthető, az adott idő alatt elbomlott atomok száma (ill. az aktivált anyag által kibocsátott részecskék száma, vagy ezek detektált hányada) binomiális eloszlást követ, melynek várható értéke az időben nem csökken.

A detektált részecskék számának binomiális típusú eloszlása más megközelítéssel is magyarázható: az aktiválás mögött valamilyen (általában nagyon kis) valószínűséggel lejátszódó magreakció áll. A besugárzott anyag  $N$  számú atomjából valamilyen  $p$

valószínűséggel  $m$  darab aktiválódik. Ezek közül aztán egy bizonyos időintervallumban  $p'$  valószínűséggel  $m'$  darab bocsátja ki a folyamatnak megfelelő részecskét. Az  $m'$  részecske közül pedig  $p''$  valószínűséggel  $m''$  darab számlálódik meg a detektorban. A teljes folyamatot így  $N$  és  $p \cdot p' \cdot p''$  paraméterekkel rendelkező binomiális eloszlás írja le. A paraméterek a valóságban legtöbbször nem határozhatók meg.

A detektált részecskék számának binomiális eloszlásához valójában elegendő az utolsóként leírt részfolyamat is: a detektorban megszámlálásra kerülő részecskék száma a megelőző folyamatoktól függetlenül binomiális eloszlást követ. Ennek Poisson-közelíthetőségét azonban biztosabban garantálja az a tény, hogy a megelőző folyamatok is binomiális eloszlás szerint mennek végbe, tekintve, hogy a detektorba jutó részecskék számánál a forrás által kibocsátott részecskék száma jóval nagyobb, a  $p''$ -vel jelölt paraméternél pedig a  $p \cdot p' \cdot p''$  szorzat jóval kisebb.

## 2. Spektrumok

### 2.1 A spektrumok létrejötte

A különböző típusú részecskék észlelésére szolgáló detektoroknak, ill. a detektor jelét feldolgozó elektronikai egységeknek kötetekre rúgó irodalma van. Jelen dolgozat tárgyához ezekből csak a végeredményül kapott spektrumok alapvető tulajdonságai, legfőképpen statisztikus viselkedésük tartozik hozzá. Ezért ennek a témának itt csak egy egészen vázlatos, és a fenti szempontra korlátozódó leírása következik.

A spektroszkópiai célokra alkalmas detektorok a beérkező részecskék száma mellett azok energiáját is „érzékelni” tudják. A detektor kimenő jelének amplitúdója az, ami arányos a beérkezett részecske energiájával. Tökéletes detektor azonban nincs: a monoenergiás sugárzás hatására kapott jelamplitúdók mindig fluktuálnak valamilyen mértékben egy adott érték körül. A fluktuáció mértékét és jellegét az ún. detektor válaszfüggvény írja le, amely a monoenergiás sugárzással való bombázás eredményeként kapott jelamplitúdó-spektrum. Ez az esetek többségében tekinthető Gauss-görbének. Ezen görbe szélességének segítségével definiálható a detektor energiafelbontása. A legjobb felbontásúak, azaz legkeskenyebb válaszfüggvénnyel rendelkeznek a félvezető detektorok. A felbontásnak fontos szerepe van a kialakuló spektrum szempontjából, mert minél jobban „elkenődik” a csúcs, annál nehezebb elválasztani a háttértől, vagy a hozzá közel eső más csúcsoktól.

A detektor jelét különböző elektronikai egységek alakítják digitális formában tárolt spektrummá. Ezek közül itt egyről, a sokcsatornás analizátorról érdemes szót ejteni. Ez a vizsgált energiatartományt sok kis, jellemzően egyenlő részre, (ún. csatornára) osztja, és a detektorból érkező impulzusokat amplitúdójuktól függően a megfelelő csatornában regisztrálja. Így a kapott spektrum végeredményben egy diszkrét energia-beütésszám függvénynek felel meg.

A csatornák számának megválasztása lényeges kérdés. A csatornák számának növelése bizonyos határig javítja a felbontást, mivel a diszkrét függvény ezzel egyre jobban közelíti a valójában folytonos eloszlást. A másik tényező viszont, amely a csatornák számának korlátlan növelése ellen szól, a beütések véges száma. Több csatorna esetén kevesebb beütés jut egy csatornába, ami a csatornatartalmak relatív statisztikus ingadozásának növekedését okozza. Ez a viszonylag kis csúcsoknak a háttérben való „eltűnéséhez” vezethet.

A csatornatartalmak, többször, ugyanolyan körülmények között elvégezve egy mérést, statisztikus ingadozást mutatnak. Ez az ingadozás csatornánként független, binomiális eloszlásokkal írható le, amely a korábban leírt feltételek mellett közelíthető (vagy nem) Poisson- ill. Gauss-eloszlással.

A spektrum a spektroszkópus nézőpontjából hasznos információt hordozó, ill. zavaró részekből tevődik össze. Utóbbiakat eredetüktől függetlenül, összefoglalóan háttérnek hívják. Valójában a háttér definíciója nem egyértelmű: a „forrás nélkül felvett spektrum”-tól elkezdve addig a meghatározásig, hogy „háttér mindaz, ami nem a vizsgált csúcs” az irodalomban előforduló definíciók széles skálán mozognak [DEB88]. A meghatározástól függetlenül a zavaró hatások minden spektrumban kiküszöbölhetetlenül jelen vannak, és forrásai az alkalmazott spektroszkópiai eljárástól és kiegészítő technikáktól függően mások és mások lehetnek. Gamma- ill. röntgenspektroszkópiában az ún. teljes energiájú csúcs hordozza a hasznos információt, amely mindazon fotonok által keltett impulzusokból áll, amelyek teljes energiájukat a detektor anyagában adják le, egy, vagy több lépésben.

A cél tehát a teljes energiájú csúcsok elkülönítése a háttértől, azaz a hozzájuk rendelhető beütések számának minél jobb megbecslése. Egy kis kitérő után ennek lehetséges módjairól lesz szó.

## 2.2 Spektrumok szimulációja

Szimulált spektrumrészletek kiértékelése lényeges részét képezi a dolgozatnak: a kiértékelő módszer teszteléséhez elengedhetetlenül fontos a vizsgált mintaösszetevőtől származó beütések számának (azaz a valódi csúcsterületnek) a pontos ismerete. Mért spektrumok esetén ezt az értéket csak közelítőleg ismerhetjük. A valós folyamatokat a lehetőségekhez mérten minél jobban követő szimulációkkal viszont a valódiakkal azonos típusú spektrumrészleteket kapunk, amelyeknek azonban minden lényeges paramétere ismert: a csúcsterület és a háttér várható értéke, de akár konkrét értéke is. A kiértékelő módszer eredményessége így jól vizsgálható.

A vizsgálatainkhoz szükséges spektrumrészletek előállításához szükség volt egyrészt Poisson-eloszlású véletlenszámok generálására (az össz háttér-beütésszám, ill. bizonyos esetekben az össz csúcs-beütésszám megállapításához) másrészt az így meghatározott össz-beütésszámok



véletlenszerű szétosztására a megadott számú csatornában. Ez a csúcs és a háttér esetében különböző módszerrel történt. Ezen módszerek leírása következik az alábbiakban.

### *Poisson-eloszlású véletlenszámok generálása*

Poisson-eloszlású véletlenszámok generálása legprecízebben a radioaktív bomlás valódi folyamatának követésével történhet. Ismert, hogy az egyes bomlások között eltelt idők exponenciális eloszlású valószínűségi változó értékei, feltéve, hogy a bomlásra képes atomok száma közben jelentősen nem csökken. Ekkor, mint azt az 1.3 alfejezetben be is láttuk, a  $[0, T]$  időintervallumban bekövetkezett bomlások száma olyan Poisson-eloszlást követ, amelynek paramétere  $\alpha T$ , ahol  $\alpha$  az exponenciális eloszlás paramétere.

Exponenciális eloszlású véletlenszámok az ún. inverz eloszlás módszerének segítségével generálhatók [LUX91]. A számítógépek  $[0;1]$  intervallumon egyenletes eloszlású (pseudo)-véletlenszámok előállítására képesek. Az inverz eloszlás módszere szemléletesen a következőt jelenti: derékszögű  $(x, y)$  koordináta-rendszerben ábrázoljuk az exponenciális eloszlás eloszlásfüggvényét, majd a  $[0;1]$  intervallumon egyenletes eloszlású véletlenszámokat generálunk. Ezeket a véletlenszámokat  $y_i = F(x_i)$  függvényértékeknek tekintve megkeressük a hozzájuk tartozó  $x_i$  abszcisszákat. Az így kapott  $x_i$  számok exponenciális eloszlású véletlenszámoknak tekinthetők. Valójában a feladat megoldása nem geometriai jellegű, hanem az  $F(x)$  eloszlás inverzének meghatározásával történik. Mivel itt bomlások között eltelt időket generálunk, a változót  $t$ -vel jelölve az exponenciális eloszlás eloszlásfüggvénye:

$$F(t) = 1 - e^{-\alpha t}. \quad (2.1)$$

Ebből  $t$ -t kifejezve:

$$t = -\frac{1}{\alpha} \ln(1 - F(t)). \quad (2.2)$$

Az inverz eloszlás módszere szerint  $F(t)$  a  $[0;1]$  intervallumon egyenletes eloszlású valószínűségi változó. Ekkor viszont  $1 - F(t)$  is az, így írhatjuk, hogy

$$t = -\frac{1}{\alpha} \ln U, \quad (2.3)$$

ahol  $U$  a  $[0;1]$  intervallumon egyenletes eloszlású véletlenszám. A  $T$  időpontig bekövetkezett bomlások számának kiszámításához (azaz a Poisson-eloszlású véletlenszám előállításához) az így generált  $t$  időket kell összeadni addig, amíg összegük meg nem haladja  $T$ -t. Az így végigfutott ciklusok száma mínusz egy a keresett Poisson-eloszlású véletlenszám.

A háttér esetében az így előállított össz-beütésszámot kell egyenletesen elosztani a  $k$  csatornában. Ehhez nem kell mást tenni, mint a  $[0;1]$  intervallumot  $k$  egyenlő részre felosztani, és egyenletes eloszlású véletlenszámok generálásával az összes beütést "kisorsolni" valamelyik csatornába. Ezzel az eljárással csatornánként olyan binomiális eloszlású beütésszám-értékeket kapunk, amelynek paraméterei  $N$ : a tartomány össz-beütésszáma,  $p = 1/k$  pedig az adott csatornába esés valószínűsége. (Így konstans háttérrel kapunk abban az értelemben, hogy a háttér minden csatornában ugyanazon várható érték körül fluktuál. Ez egyszerűsítést jelent a valósághoz képest, a kiértékelő módszer tesztelése szempontjából azonban nem jelent túl nagy eltérést a mért spektrumrésztől.) A kapott binomiális eloszlás várható értéke  $Np = \lambda \cdot 1/k$ , ahol  $\lambda$  az össz-beütésszám.

A csúcsához tartozó beütések csatornába való szétszórása a Neumann-féle céltáblamódszerrel történhet [SRE65]. Ehhez egy olyan téglalapot kell létrehozni, amelynek szélessége 1, magassága pedig a csúcs alakját leíró függvény maximuma. Ezután a  $[0;1]$  intervallumon egyenletes eloszlású  $(x,y)$  véletlenszám-párokat generálunk, a téglalap 1 hosszúságú oldalát pedig felosztjuk  $k$  darab egyenlő részre. Amennyiben az  $(x,y)$  számpárra teljesül, hogy

$$\frac{i-1}{10} \leq x \leq \frac{i}{10} \quad (i = 1,2,\dots,k) \quad \text{és} \quad (2.4)$$

$$y \cdot \max(f(x)) \leq f(x), \quad (2.5)$$

$f$ -fel jelölve a csúcshalakot leíró függvényt, akkor az  $i$ -edik csatornában egy beütést regisztrálunk. Mindezt addig folytatjuk, amíg a regisztrált beütések száma el nem éri az előre meghatározott csúcsterületet.

### 2.3 A spektrumkiértékelés szokásos módjai

Spektrumok kiértékelésére általában összetett, a spektrumok tulajdonságait minden tekintetben figyelembe vevő gyári szoftverek vannak forgalomban. Ezek többnyire ugyanazokat az alapelveket használják fel, csak a konkrét megvalósítás, és a kiegészítő eljárások különböznek. Ebben az alfejezetben az alapelvekről lesz szó.

A spektrumok kiértékelésének első lépése az energiakalibráció, melynek során a rendelkezésre álló csatornaszám - beütésszám függvényt energia – beütésszám függvénné konvertáljuk. Ez általában a spektrum legalább két, pontosan ismert energiájú és nagy beütésszámú csúcsa alapján történik.

A következő lépés a csúcskeresés, ez többféle algoritmus szerint történhet. A csúcskeresők általában digitális szűrők; ezek állapítják meg, hogy az illesztő algoritmus a spektrumban hány csúcst illesszen és azok energiájának kezdőértékéül milyen energiát válasszon.

Ezután az illesztő algoritmus folytatja a feldolgozást. Ez egyszerre illeszti a csúcsalak valamennyi paraméterét: helyét, szélességét, magasságát.

Ezután következik a csúcsok területének meghatározása. Ez is többféle módon történhet, és itt érdemes megjegyezni azt is, hogy a csúcsterület nem egy egzakt, jól definiált mennyiség: értéke függ a meghatározás módszerétől.

A továbbiakban a következő elnevezéseket használjuk: illesztőfüggvénynek nevezzük a vizsgált spektrumtartományon a csatornánkénti beütésszámokhoz illesztett (jellemzően folytonos) függvényt. Ez tartalmazza mind a háttérrel, mind a csúcst leíró függvényeket. Modellfüggvénynek nevezzük a csúcsalakot leíró függvényt (ez az általunk vizsgált esetek zömében Gauss-függvény). Végül célfüggvénynek nevezzük azt a függvényt, amely szélsőértékének megkeresésével határozható meg az optimális illesztés: azaz az illesztőfüggvény paramétereinek azon értéke, amelyek mellett ez legjobban illeszkedik a vizsgált spektrumtartományhoz.

Legegyszerűbb a háttér levonásával történő meghatározás. Ennél a módszernél a levonandó háttérértéket a csúcs két oldalán elhelyezkedő spektrumrészek beütésszámainak átlagaként kaphatjuk meg. Ez a módszer csak kifejezetten nagy beütésszámértékek, jó statisztika esetén alkalmazható. A háttér levonása után visszamaradt csatornánkénti beütésszámok közvetlenül egy valószínűségi eloszlás konstansszorosának tekinthetők. A csúcs helyét ezen eloszlás első

momentumaként, szélességét pedig második centrális momentumaként kaphatjuk meg. A csúcsterület hibája a hibaterjedés szabályainak megfelelően az össz-beütésszám és a háttér-beütésszám hibáinak négyzetösszegéből vont négyzetgyökként kapható meg, mely előbbiek Poisson-statisztikát követnek, így hibájuk közvetlenül számítható.

### 2.3.1 Spektrum-tartományok kiértékelése a legkisebb négyzetek módszerével

A másik, és egyben legelterjedtebb csúcsterület-meghatározási mód a súlyozott legkisebb négyzetek módszerén alapuló görbeillesztéses eljárás. Itt a vizsgált spektrumtartományhoz két folytonos függvényt illesztünk: a csúcst, illetve a háttér leíró függvényeket. Ezek alakja a konkrét spektroszkópai alkalmazástól függ, a háttér leíró legegyszerűbb függvény a konstans, a csúcst leíró függvények legegyszerűbbike pedig a Gauss-görbe. A háttérhez majdnem mindig ennél bonyolultabb függvényt illesztnek, a csúcs illesztésére viszont bizonyos esetekben ténylegesen megfelel a Gauss-függvény. Ebben az egyszerű esetben a csúcst tekintve két illesztendő paraméter van: a csúcs magassága és szélessége. A csúcs területe ezen paraméterekből számítható ki magasság  $\times$  szélesség  $\times \sqrt{\pi}$  módon.

Az illesztés az 1.2.1 alfejezetben leírt általános elveknek megfelelő módon történik. Legyenek a  $k$  csatornából álló spektrumrészletben a csatornánkénti beütésszámok:  $y_1, y_2, \dots, y_k$ . Az illesztendő paraméterektől függő, és a háttér ill. a csúcs alakját leíró illesztőfüggvényt jelölje  $f(x; a_1, a_2, \dots, a_n)$ , ahol  $a_i$  az illesztendő paramétereket jelöli. A minimalizálandó  $S$  célfüggvény az 1.14 összefüggésnek megfelelően

$$S = \sum_{i=1}^k \left( \frac{y_i - f(x_i; a_1, \dots, a_n)}{\sqrt{y_i}} \right)^2 \quad (2.6)$$

alakú. A nevezőben a csatornatartalmak Poissont közelítő Gauss-eloszlása miatt szerepel  $\sqrt{y_i}$ , mint a mért értékek szórása. Ugyanezen eloszlás miatt az  $S$  célfüggvény megfelel a  $\chi^2$ -függvénynek. A  $\chi^2$ -eloszlás szabadsági foka ebben az esetben a csatornaszám, mínusz az illesztett paraméterek számával egyezik meg. Az illesztés ezért akkor végezhető el, ha a csatornaszám meghaladja az illesztett paraméterek számát.

A paraméterek hibája az 1.2.2 alfejezetben leírtak szerint a Hess-mátrix invertálásával kapható meg oly módon, hogy az inverz mátrix diagonál-elemei a paraméterek varianciáját, diagonálison kívüli elemei pedig a paraméterek kovarianciáját tartalmazzák. A csúcsterület hibája a paraméterek hibájából a hibaterjedés szabályainak megfelelően számolható. A kovariancia ebben az esetben általában negatív; ennek következtében a csúcsterület hibája általában kisebbnek adódik, mintha függetlennek tekintett paraméterek hibájából származott volna, és jó illesztés esetén (felülről) közelíti a terület négyzetgyökét.

A csúcsterület-meghatározásnak ez az utóbbi módja jó eredményeket szolgáltat mindaddig, amíg a csatornatartalmak és az illesztett paraméterek Gauss-eloszlásúnak tekinthetők. A kis beütésszámok tartománya az, ahol ezek a feltételek nem, vagy nem jó közelítéssel teljesülnek. Korábbi vizsgálatok bebizonyították [MÉR96], hogy ezen a tartományon a fenti módszer rosszul becsli mind a csúcsterületet, mind a csúcsterület hibáját. A spektrumkiértékelő szoftverek ezért tartalmazhatnak bizonyos kiegészítő algoritmusokat a kis beütésszámok tartományára, pl. a Hypermet PC program 25 alatti csatornánkénti beütésszámok esetén három csatorna tartalmának átlagával számol a 2.6 összefüggés nevezőjében [Phi76].

### 2.3.2 Kiértékelés a maximum likelihood módszerrel

Bár a gyakorlatban csak elvétve fordul elő, a teljesség kedvéért mégis meg kell említeni ezt a módszert is.

A likelihood-függvény alakja attól függ, hogy a csatornatartalmakat Gauss-, vagy Poisson-eloszlásúnak tekintjük.

A csatornatartalmak Gauss-eloszlása esetén a likelihood-függvény

$$L(y_1, y_2, \dots, y_k; a_1, a_2, \dots, a_n) = \prod_{i=1}^k \frac{1}{\sqrt{2\pi y_i}} \cdot e^{-\frac{(y_i - f(x_i; a_1, \dots, a_n))^2}{2y_i}} \quad (2.7)$$

alakban írható fel. A jelölések az előző alfejezet jelöléseivel egyeznek meg, mint ahogy a  $\sigma_i = \sqrt{y_i}$  helyettesítést is alkalmaztuk az előzőekben leírtak miatt.

A likelihood-függvény logaritmususa pedig:

$$\ln L = \sum_{i=1}^k \left[ \ln \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi y_i}} \right) - \frac{(y_i - f(x_i))^2}{2y_i} \right]. \quad (2.8)$$

A csatornatartalmak Gauss-eloszlása esetén szoros összefüggés áll fenn a maximum-likelihood módszer és a legkisebb négyzetek módszere között, hiszen

$$\ln L = -\frac{1}{2} \chi^2 + C \quad (2.9)$$

alakú, ahol a  $C$  konstans tartalmazza az  $\ln \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi y_i}} \right)$  tagok összegét, amely a paraméterek becslését nem befolyásolja. A likelihood-függvény maximumhelye ebben az esetben tehát megegyezik a  $\chi^2$ -függvény minimumhelyével. Ezért Gauss-eloszlás esetén a maximum likelihood becslés és a legkisebb négyzetek módszere azonos eredményre vezet.

Amennyiben a csúcsterületet Poisson-eloszlásúnak tekintjük, a legkisebb négyzetek módszere nem, csak a maximum likelihood elv alkalmazható. Ebben az esetben a likelihood-függvény alakja a következő:

$$L = \prod_{i=1}^k \frac{(f(x_i))^{y_i}}{y_i!} e^{-f(x_i)}. \quad (2.10)$$

A maximum likelihood becslés ezen formájának használata kis beütésszámú spektrumok kiértékelésénél indokolt, ahol a csatornatartalmak eloszlásának Gauss-eloszlással való közelítése helytelen. A módszer hátránya, hogy a csúcsterület hibájának becslése nem egyszerű. Míg ugyanis Gauss-eloszlás esetén az  $e^{-x^2/2}$ -függvénynek ill. a likelihood-függvény logaritmusának a paraméterek szerinti második deriváltjai a paraméterektől nem függenek, ez a Poisson-eloszlásra felírt likelihood-függvény esetén nem teljesül. A szakirodalom a probléma megoldásának több módját javasolja, azonban ezek mindegyike csak közelítő pontossággal szolgáltatja a paraméterek becsült hibáját. Ilyen áthidaló megoldás lehet a második derivált átlagának vétele a maximum környezetének egy olyan, alkalmasan választott tartományán, ahol a likelihood-függvény értéke nagy [LYO86]. Egy másik lehetséges

hibameghatározási mód a paraméter értékének kiszámítása az  $\ln L$  függvény maximumától  $1/2$ -del eltérve jobbra és balra. A paraméter hibája a maximumnál vett értékének eltérése ettől a két értéktől [HAN99]. Az így kiszámított hibaintervallumok hossza viszont csak Gauss-eloszlás esetén fog megegyezni a becült érték két oldalán.

## 2.4 A teljes valószínűségi módszer

A 2.3 alfejezetben bemutatott csúcsterület-meghatározó eljárások mindegyike jó statisztikájú (nagy beütésszámú, jó csúcs/háttér arányú) csúcsok területének meghatározására használható csak megfelelő megbízhatósággal. Amennyiben olyan spektrumrészletet kell kiértékelnünk, amelyben már az is nehezen dönthető el, hogy amit látunk, az valódi csúcs-e, vagy csak a háttér fluktuációja, a görbeillesztés többnyire elfogadhatatlanul nagy hibával végezhető el. A spektroszkópusok általában nem is foglalkoznak ilyen kis beütésszámú csúcsok kiértékelésével, ami pedig hasznos lehet például környezeti minták analízise során, nyomelemek mennyiségének meghatározásánál, vagy csekély mennyiségű radioaktív szennyeződés kimutatásánál.

Amennyiben a csúcsterületet mégis görbeillesztéssel akarjuk meghatározni, egy másik problémával is szembe kell néznünk: kis beütésszámoknál a csúcsterület becslésekor a Gauss-eloszlás feltételezése helytelen. Bizonyos beütésszámig a Poisson-eloszlás használata javít az eredményeken, viszont ez nagyon megnehezíti a csúcsterület hibájának becslését. Még alacsonyabb beütésszámok esetén a Poisson-eloszlás sem alkalmazható, helyette a binomiális eloszlás használata indokolt.

A továbbiakban egy, az eddigiektől gyökeresen eltérő spektrumkiértékelő eljárás kerül bemutatásra, amely kifejezetten az egészen kis beütésszámú csúcsok területének meghatározására alkalmas. A módszer ötlete és alapelveinek kidolgozása Méray László nevéhez fűződik [Mér94], jelen dolgozat írója a módszer szimulált és mért spektrumokon való tesztelésében, alkalmazási körének bővítésében és gyakorlati spektrumkiértékelési feladatok végrehajtásában vett részt.

A módszer alap gondolata szerint, mivel a spektrum több információt hordoz, mint amennyit a görbeillesztéses eljárások felhasználnak, e többlet információ kiaknázásával a csúcsterület-meghatározás pontosabban hajtható végre. A legtipikusabb kiértékelési problémánál a

kiértékelendő spektrumrészlet egy csúcstól és háttérrel tartalmaz; a feladat e kettő szétválasztása. A görbeillesztési módszerek a csúcstól ill. a háttérrel leíró, különböző típusú függvények segítségével a vizsgálandó spektrumrészletet két részre bontják, majd megkeresik a lehetséges felbontások közül az optimálisat. A teljes valószínűségi módszer ezzel szemben a lehetséges felbontásokhoz egy-egy valószínűséget rendel, és az azonos csúcsterületre vezető felbontások valószínűségeinek összegét veszi. Az alapvető különbség ez a két módszer között: míg az előbbi a maximális valószínűséget keresi, addig az utóbbi a teljes valószínűséget (az ugyanazon végeredményre vezető események valószínűségeinek összegét). Még egy lényeges eltérés van a két módszer között: a görbeillesztési eljárások az illesztőfüggvény paramétereinek változtatásával a csúcshoz rendelt feltételezett csatornatartalmakat a vizsgált tartományon együtt, szinkronban változtatják, a teljes valószínűségi módszer viszont csatornánként, egymástól függetlenül végzi el a csúcs-háttér kettéválasztást. (Ez természetesen nem jelenti azt, hogy a teljes valószínűségi módszer figyelmen kívül hagyja a csatornatartalmak közötti kapcsolatot.)

A két módszer közötti harmadik eltérés már következményként adódik: míg a görbeillesztési eljárások számos tulajdonsága csak abban az esetben érvényes, ha a csúcsterületet Gauss-eloszlást követőnek tekintjük, addig a teljes valószínűségi módszer a csúcsterület eloszlását végeredményként szolgáltatja — ez az eloszlás pedig kis beütésszámok esetén a legkritikább esetben közelíthető csak Gauss-görbével.

A módszer matematikai megfogalmazásához kezdetben tekintsük a következő egyszerűsítő feltételeket:

- a.**, a vizsgált spektrumrészletben a háttérrel kívül legfeljebb egy csúcs van jelen
- b.**, a háttér minden csatornában ugyanazon érték körül ingadozik.

E két egyszerűsítő feltétel csak a módszer bevezetésekor a logikus felépítéshez szükséges, a későbbiekben az eljárás könnyen továbbfejleszhető több csúcstól tartalmazó spektrumrészletek esetére is, ill. a háttér várható értékének lineáris, lépcsőszerű, vagy más, tetszőleges függvény szerinti változására is.

Kiinduláskor ismertnek tekintjük a következő mennyiségeket:

1.  $n_i$  ( $i = 1, 2, \dots, k$ ) a  $k$  csatornából álló spektrumrészletben csatornánként regisztrált beütésszámok.



2.  $\langle B \rangle$  a spektrumrészletben jelenlevő háttér várható értéke. A fenti **b.**, egyszerűsítő feltétel miatt ez csatornánként  $\frac{\langle B \rangle}{k}$  várható értéket jelent. Ennek meghatározása vagy vak minta mérésekkel történhet, vagy, amennyiben ez nem lehetséges, a spektrumban a vizsgálandó csúcs „előtt” és „mögött” (nála kisebb és nagyobb energián) található háttérértékek alapján.
3.  $p_i$  ( $i = 1, 2, \dots, k$ ) a vizsgálandó csúcs spektrális eloszlása, azaz a csúcshoz tartozó beütések egyes csatornába kerülésének valószínűségei. Ezen valószínűségek meghatározásához szükséges egy azonos mérési körülmények között végzett referenciamérés egy, a vizsgálandó csúccsal azonos energiájú, de nagyon jó statisztikájú csúcsról (azaz amelyre teljesül, hogy a statisztikus hiba csatornánként  $\sqrt{a_i} \ll a_i$ . Ez esetben a  $p_i$  valószínűségeket a  $p_i = a_i / \sum_i a_i$  összefüggés szerint számoljuk minden  $i$ -re. (Amennyiben a referenciamérés valami miatt nem végezhető el, lehetőség van arra, hogy az adott mérőmódszernél, kalibrált spektrumban, adott energián érvényes ismert csúcsalakot használjuk fel a kérdéses valószínűségek kiszámítására.) Természetesen fennáll a  $\sum_{i=1}^k p_i = 1$  összefüggés.

Célunk a vizsgált spektrumrészletben a legvalószínűbb csúcsterület meghatározása, ill. az összes lehetséges csúcsterülethez a hozzá rendelhető valószínűség kiszámítása. Az  $X$  csúcsterület egy  $k$  csatornából álló spektrumrészletben többféle módon állhat elő az  $(x_i)$ ,  $i=1, 2, \dots, k$  csatornánkénti, a csúcshoz tartozónak tekintett beütések összegeként. Az  $X$  csúcsterülethez tartozó valószínűség kiszámításához először az  $\underline{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)$  lehetséges megvalósulások valószínűségeit kell meghatározni. Ehhez először tegyük fel, hogy a vizsgált spektrumrészlet mindössze két csatornából áll. Ekkor annak valószínűsége, hogy az első csatornában a csúcshoz tartozó beütések száma  $x_1$ , (a másokban pedig a  $X = \sum_i x_i$  feltétel miatt  $X-x_1$ .)

$$\rho_1 = \binom{X}{x_1} p_1^{x_1} (1-p_1)^{X-x_1}, \quad (2.11)$$

mivel a csúcs  $X$  számú, egymástól független beütés egymásutánjaként alakul ki, és így a binomiális eloszlás érvényes rá [COL74]. A fenti egyenlet kézenfekvő módon általánosítható  $k > 2$  esetre. Ekkor a

$$\rho_1 = \frac{X!}{x_1! x_2! \dots x_k!} p_1^{x_1} p_2^{x_2} \dots p_k^{x_k} \quad (2.12)$$

polinomiális eloszlást kapjuk. Miután a csatornák tartalma csúcshoz ill. háttérhez tartozó beütések számainak összegeként adódik, és mivel a háttér sem állandó, hanem várható értéke körül véletlenszerűen ingadozik, ezért annak valószínűségét is ki kell számítani, hogy az  $i$ -edik csatornában a háttér hozzájárulása a csatornatartalomhoz éppen  $y_i$ . A gyakorlatban előforduló esetek zömében a háttér csatornánként Poisson-eloszlásúnak tekinthetjük. (A teljes valószínűségi módszer matematikai leírásához nem feltétlenül szükséges ez a feltételezés; erről a későbbiekben lesz szó.)

Ekkor

$$\rho_2\left(\frac{\langle B \rangle}{k}; y_i\right) = \frac{e^{-\frac{\langle B \rangle}{k}} \left(\frac{\langle B \rangle}{k}\right)^{y_i}}{y_i!}. \quad (2.13)$$

Mivel az egyes csatornákbeli háttér-beütésszámok egymástól függetlenek, ezért a teljes vizsgált tartományon a háttér eloszlása:

$$\prod_{i=1}^k \rho_2\left(\frac{\langle B \rangle}{k}; y_i\right) = \frac{e^{-\langle B \rangle} \left(\frac{\langle B \rangle}{k}\right)^{\sum y_i}}{y_1! y_2! \dots y_k!}. \quad (2.14)$$

A 2.14 egyenlet megadja annak valószínűségét, hogy a  $k$  csatornából álló tartományon a háttérnek tulajdonítható beütésszámok rendre  $y_1, y_2, \dots, y_k$ . Ezek után a csúcshoz tartozó  $\underline{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)$  és a háttérhez tartozó  $\underline{y} = (y_1, y_2, \dots, y_k)$  beütésszámok egyidejű bekövetkezésének valószínűsége a 2.12 és a 2.14 kifejezések szorzata:

$$\ln L = -\frac{1}{2} \chi^2 + C. \quad (2.15)$$

Mivel az egyes csatornákbeli össz-beütésszámok ismertek (ezekből áll a spektrum) ezért a fenti 2.15 összefüggésben teljesülnie kell az

$$y_i = n_i - x_i \quad (2.16)$$

feltételnek is. Így 2.15 egyszerű átalakítások után 2.16 figyelembe vételével a következőképpen módosul:

$$\rho(\underline{x}) = \frac{X!}{x_1!x_2!\dots x_k!} p_1^{x_1} p_2^{x_2} \dots p_k^{x_k} \cdot \frac{e^{-\langle B \rangle} \langle B \rangle^{N-X}}{k^{N-X} (n_1 - x_1)! (n_2 - x_2)! \dots (n_k - x_k)!}, \quad (2.17)$$

ahol  $N$  a teljes vizsgált tartományon észlelt össz-beütésszám:  $N = \sum_i n_i$ .

Tekintve, hogy célunk nem egy  $\underline{x}$  konfigurációhoz tartozó valószínűség kiszámítása, hanem egy  $X$  csúcsterülethez tartozó, ezért a 2.17-ben szereplő  $\rho(\underline{x})$  részvalószínűségeket összegezni kell minden olyan  $\underline{x}$ -re, amelyre teljesül, hogy

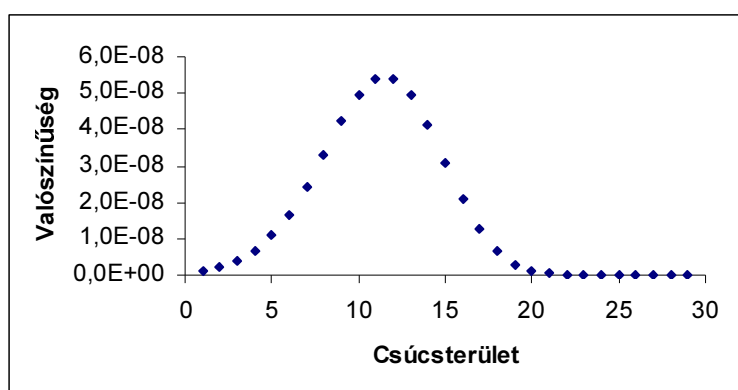
$$\sum_i x_i = X. \quad (2.18)$$

Ekkor az  $X$  csúcsterülethez rendelt valószínűség:

$$Q(X) = \sum_{\underline{x}} \frac{X! p_1^{x_1} p_2^{x_2} \dots p_k^{x_k}}{x_1! x_2! \dots x_k!} \cdot \frac{e^{-\langle B \rangle} \langle B \rangle^{N-X}}{k^{N-X} (n_1 - x_1)! (n_2 - x_2)! \dots (n_k - x_k)!} \quad (2.19)$$

A 2.19 egyenlet alapján minden lehetséges csúcsterülethez kiszámíthatjuk a hozzá tartozó valószínűséget (természetesen  $X$  nemnegatív egész értékeket vehet fel). A csúcsterületek függvényében ábrázolva a hozzájuk rendelt valószínűségeket, egy, a 2.1 ábrán láthatóhoz hasonló diszkrét értékű függvény képét kapjuk.

2.1 ábra. A kiértékelés végeredménye a teljes valószínűségi módszer szerint



Ezek a függvények az esetek túlnyomó többségében jól definiált maximummal rendelkeznek. A maximum helyét tekinthetjük a csúcsterület becslt értékének. A függvénygörbe alakja viszont általában, mint itt is, aszimmetrikus. Ez lényeges tulajdonság, mert a 2.3 alfejezetben leírt eljárások a csúcsterület hibájának becslésekor a csúcsterület eloszlását normálisnak (ezzel egyúttal szimmetrikusnak) tételezik fel. A csúcsterület hibájára adott  $\pm\sigma$  becslés kis beütésszámok esetén az aszimmetria miatt nem helytálló.

Bár az összes lehetséges esetet figyelembe vettük, a görbe alatti terület, pontosabban, diszkrét értékű függvényről lévén szó, a  $\sum_{X=0}^N Q(X)$  mennyiség nem egyenlő 1-gyel. Ennek oka a 2.16 feltételben keresendő. Mind a Poisson- mind a polinomiális eloszlás esetében a változó(k) tetszőleges, nemnegatív egész értékéhez 0-nál nagyobb valószínűség tartozik. Ilyen értelemben tehát nem vettük figyelembe az összes bekövetkező eseményt. Az 1-re normálás, azaz a  $Q(X)$  valószínűségek helyett a

$$\frac{Q(X)}{\sum_{X=0}^N Q(X)} \tag{2.20}$$

valószínűség szerepeltetése mégsem önkényes, hiszen a 2.16 feltétellel a lehetséges események körét szűkítettük le, és így abban a „világban”, amelyet az adott spektrum meghatároz, az összes lehetséges eseményt figyelembe vettük. Az 1-re normált eloszlás számos jó tulajdonsággal bír: segítségével kiszámíthatjuk előre megadott csúcsterület-intervallumba esések valószínűségét, vagy valamely kritikus csúcsterület-érték meghaladásának valószínűségét.

Korábbi vizsgálatok során [MÉR96] felmerült, hogy a  $\sum_{X=0}^N Q(X)$  mennyiség esetleg egyfajta jósági tényező szerepét töltheti be (funkcióját tekintve analóg módon a görbeillesztés jóságát jellemző  $\chi^2$  értékkel). Révay egy  $\chi^2$ -szerű minősítő faktor és a  $\sum_{X=0}^N Q(X)$  mennyiség között egyértelmű korrelációt mutatott ki [RÉV97].

A módszer fenti megfogalmazása a háttér esetében a tényleges binomiális eloszlást Poisson-eloszlással közelítette. Ez a közelítés nem feltétlenül szükséges a matematikai leíráshoz. A

hátteret – a csúcshoz hasonlóan – tekinthetjük polinomiális eloszlásúnak a  $k$  csatornából álló tartományon. Ekkor annak valószínűsége, hogy a háttértől származó beütések száma  $N - X$ :

$$\rho_2 = (N - X)! \prod_{i=1}^k \frac{(1/k)^{n_i - x_i}}{(n_i - x_i)!}, \quad (2.21)$$

ahol (csatornánként megegyező háttér várható értéket feltételezve) az egyes csatornába esések valószínűségei megegyeznek, így a polinomiális eloszlás képletében szereplő  $k$  darab valószínűség mindegyike  $1/k$ . A 2.19 képlet analógiájára a  $Q(X)$  valószínűség ezek után:

$$Q(X) = \sum_{\underline{x}} \frac{X! p_1^{x_1} p_2^{x_2} \dots p_k^{x_k}}{x_1! x_2! \dots x_k!} \cdot \frac{(N - X)! (1/k)^{N - X}}{(n_1 - x_1)! (n_2 - x_2)! \dots (n_k - x_k)!} \quad (2.22)$$

Arról, hogy a módszer két matematikai megfogalmazásával kapott eredmények mennyire térnek el egymástól, a gyakorlati alkalmazásoknál fog szó esni. Egy technikai jellegű különbségről viszont itt kell szót ejteni: míg a  $Q(X)$ -re adott első összefüggésnél  $\langle B \rangle$ -t, a háttér várható értékét a módszertől függetlenül, külön kell meghatározni, addig a második esetben erre nincs szükség. Az első képletben a háttér várható értéke kiinduló adat, a módszer ezt „biztosnak” tekinti, és becslésének esetleges bizonytalanságát az eredményekben nem veszi figyelembe. Ez azt eredményezi, hogy az első képlettel kapott eredmények valamivel keskenyebb eloszlásgörbét mutatnak, mint a második képlettel számoltak, mivel ez utóbbi esetben a háttér várható értéke nem rögzített. Ez azonban nem jelenti azt, hogy az első képlet pontosabb eredményeket szolgáltatna, csupán a statisztikus hiba nem teljes egésze jelenik meg az eredményekben.

A gyakorlatban mindig a konkrét feladat dönti el, hogy melyik képlet használata célszerűbb. Amennyiben a háttér várható értéke a fejezet elején leírt valamelyik eljárással viszonylag pontosan meghatározható, az első összefüggést érdemes alkalmazni, ellenkező esetben a másodikat.

A 4. fejezetben részletes vizsgálatok alapján be fogjuk látni, hogy az igazi különbség a módszer két megfogalmazása között nem is a Poisson-eloszlás közelítő voltában, hanem a háttér várható értékének különböző meghatározási módjában van.

Egy lényeges dolgot meg kell még jegyezni a teljes valószínűségi módszerrel kapcsolatban. A módszer leírása során végig csúcsterületek *valószínűségéről* volt szó. Ez az egyszerűség – és a megfelelő szó hiánya – miatt volt így. Valójában a csúcsterület számunkra ismeretlen állandó, így a szó matematikai értelmében valószínűség nem rendelhető hozzá (pontosabban: az egyes csúcsterületek valószínűsége vagy 1, vagy 0). Azonban a csúcsterületekhez a módszer által rendelt 0 és 1 közötti szám az inverz valószínűséggel sem azonosítható, mivel nem normál valószínűségekből a Bayes-tétel segítségével származtatott mennyiség. Jelentését tekintve leginkább a Fisher által bevezetett *likelihood* fogalommal egyezik meg (ld. 1.2.2 alfejezetet). Mivel a magyar nyelv nem különbözteti meg a *probability* és a *likelihood* szavak fordítását, ezért a továbbiakban is a valószínűség szót fogjuk használni mindkettőre, mert ennek értelemzavaró hatása a dolgozatban tárgyalt kérdésekre nézve nincs.

A módszer által a csúcsterületekhez rendelt 0 és 1 közötti számokkal egy helyen végzünk olyan számításokat, amelyek jogosságához ezen számok valószínűségi jelentése szükséges. Az első ránézésre talán feleslegesnek tűnő 4.3 alfejezet azért kapott helyet a dolgozatban, hogy ezen számítások helyességét igazolja a gyakorlat oldaláról.

## **2.5 Kimutatási határ (L. Currie definíciója)**

A kimutatási határ fontos jellemzője a különféle analitikai eljárásoknak. Attól függően, hogy milyen spektrometriai módszert alkalmazunk, a kimutatási határnak nemcsak az értéke, de a definíciója is különböző lehet.

Lloyd Currie 1968-as munkájában [CUR68] felsorol néhányat a radiokémiai gyakorlatban használt definíciók közül. Ezek némelyike a háttér standard deviációjának 1-2-3-szorosaként definiálja a kimutatási határt, van, amelyik a csúcs standard deviációját is figyelembe veszi, és vannak Currie által nem statisztikai jellegűnek nevezett definíciók is, mint pl. a háttér kétszerese, vagy 10%-a, 1000 dpm ( $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -sugárzás detektálásánál), 100 dps ( $\gamma$ -sugárzásnál). Az azonos feltételek mellett az említett definíciók alapján számolt kimutatási határ értékek széles skálán mozognak. Currie, a szóban forgó cikkében egzakt, és általános érvényű definíciót adott a kimutatási határra. Miután saját, a kimutatási határra és vele kapcsolatos fogalmakra vonatkozó számításaink ezen a definíción alapulnak, a továbbiakban ezt részletesen ismertetem.

Currie cikkében három fogalmat definiál, amelyek a kvalitatív kimutathatósággal és a kvantitatív meghatározhatósággal vannak kapcsolatban.

A kritikus szint (*critical level*)  $L_C$ , (más források döntési küszöb-ként (*decision threshold*) említik) egy konkrét mérés kiértékelésekor szolgáltat információt arra nézve, hogy az észlelt nettó jel nagysága elegendő-e ahhoz, hogy eredetére nézve – egy előre megadott valószínűséggel – valamilyen megállapítást tegyünk. (Nettó jel alatt a háttér levonása után megmaradó beütésszámot értjük.)

A kimutatási határ (*detection limit*)  $L_D$  mindig valamilyen mérőmódszert jellemez, megadja azt a legkisebb nettó jel-nagyságot, amely az adott mérési eljárás és körülmények között elegendő ahhoz, hogy az előre megadott megbízhatósággal állíthassuk: detektáltuk a minta vizsgált összetevőjét.

A kvantitatív meghatározás küszöbértéke (*determination limit*)  $L_Q$  adott statisztikus hiba melletti kvantitatív meghatározás lehetőségére ad meg alsó értékhatárt.

Mindhárom fogalom definíciója valószínűségi számítási, ill. statisztikai megfontolásokon alapul, és mindegyik küszöbérték függ egy, az analitikus által előre megadható, 0 és 1 közötti számtól, amely megszabja, hogy milyen megbízhatósággal követeljük meg eredményeink helyességét.

Lényeges különbség  $L_C$  és  $L_D$  között, hogy míg az előbbi egy konkrét, már elvégzett mérésre vonatkozik, addig az utóbbit a mérések elvégzése előtt, a módszerre jellemzően kötjük ki. Így a kritikus szint egy *a posteriori* döntéshez, míg a kimutatási határ egy *a priori* becsléshez tartozik. A definíciók születésekor sokcsatornás analizátorok még nem álltak a spektroszkópusok rendelkezésére, így a „csúcsterület” meghatározása mindig két mérés alapján történt: a minta vizsgált összetevőjének jelenlétében, ill. anélkül kapott beütésszám különbségének kiszámításával. Currie cikkében a két mérés során kapott beütésszámokat, és ezek különbségét egyaránt Gauss-eloszlásúnak tette fel.

$L_C$  és  $L_D$  matematikai megfogalmazása statisztikai hipotézisvizsgálat segítségével történik. Szükséges hozzá az első- és másodfajú hiba fogalmának bevezetése: az elsőfajú hibát akkor követjük el, amikor arra a következtetésre jutunk, hogy a vizsgált komponens jelen van a mintában, miközben valójában nincs (az elsőfajú hiba valószínűségét  $\alpha$ -val jelöljük). Másodfajú hibát követünk el, ha a vizsgált összetevőt jelen nem levőnek nyilvánítjuk, miközben valójában jelen van a mintában (a másodfajú hiba valószínűsége:  $\beta$ ). Az első- és másodfajú hibák értékét a felhasználó szabja meg attól függően, hogy mennyire kíván „biztos lenni” a kapott eredmények helyességében.



$L_C$  definiálásához a következő eljárást követjük: a nettó jel várható értékét 0-nak véve tekintjük annak valószínűségi sűrűségfüggvényét (mely esetünkben 0 várható értékű,  $\sigma_0$  szórású Gauss-függvény).<sup>\*</sup> Ekkor a kritikus szint a következő összefüggéssel adható meg:

$$L_C = k_\alpha \sigma_0, \quad (2.23)$$

ahol  $k_\alpha$  a standard normál eloszlás  $1-\alpha$  valószínűséghez tartozó pontjának abszcisszája. Az *a priori* kimutatási határ ezek után a kritikus szint segítségével definiálható:

$$L_D = L_C + k_\beta \sigma_D, \quad (2.24)$$

ahol  $k_\beta$  jelentése  $k_\alpha$ -éval analóg,  $\sigma_D$  pedig az  $L_D$  nagyságú nettó jel szórása.  $L_C$  és  $L_D$  szemléletes jelentését és kapcsolatukat a 2.2 ábra mutatja be.

2.2 ábra. A kritikus szint és a kimutatási határ ([Cur68]-ből átvéve)

A kvantitatív meghatározás küszöbértéke a kimutatási határhoz hasonlóan a mérőmódszerre jellemző, a konkrét mérések elvégzése előtt meghatározandó mennyiség, melyet a következő összefüggés definiál:

$$L_Q = k_Q \sigma_Q \quad (2.25)$$

ahol  $\sigma_Q$  az  $L_Q$  várható értékű nettó jel szórása,  $k_Q$  pedig a felhasználó által megkövetelt relatív hiba reciproka.

---

<sup>\*</sup> Formálisan ez a függvény úgy határozható meg, hogy a vizsgált összetevő nélkül nagy számú mérést végzünk el, és a kapott beütésszám-értékeket kivonjuk a háttér ismert várható értékéből. Az így kapott számok

Abban a speciális esetben, ha mérési eredményeink olyan jellegűek, hogy valószínűségi szempontból Poisson-eloszlást közelítő Gauss-eloszlással írhatók le, a fenti három összefüggés konkrétabb formában is megadható.

Jelölje  $\mu_B$  a háttér várható értékét,  $\sigma_B$  pedig a szórását.  $\mu_{B+S}$  a várható értéke az összes észlelt beütések számának a minta vizsgált összetevője jelenlétében,  $\sigma_{B+S}$  a megfelelő szórásérték. A nettó jel paraméterei az előzőekből számíthatók:  $\mu_S = \mu_{B+S} - \mu_B$  a várható érték,  $\sigma_S = (\sigma_{B+S}^2 + \sigma_B^2)^{1/2}$  pedig a szórás, a hibaterjedés szabályainak megfelelően. Megjegyzendő még, hogy a Poisson-eloszlás tulajdonságai miatt a  $\sigma = \sqrt{\mu}$  összefüggés teljesül a megfelelő paraméterértékek között mindhárom esetben. Egyszerű matematikai átalakítások után  $L_C$ -re és  $L_D$ -re a következő összefüggések adódnak:

$$L_C = k_\alpha \sqrt{2\mu_B} , \quad (2.26)$$

$$L_D = L_C + \frac{k_\beta^2}{2} \left[ 1 + \left( 1 + \frac{4L_C}{k_\beta^2} + \frac{4L_C^2}{k_\alpha^2 k_\beta^2} \right)^{1/2} \right] . \quad (2.27)$$

Amennyiben – amint ez a gyakorlatban általában szokás is – az első- és másodfajú hibák valószínűségét ugyanakkorának választjuk,  $L_D$  kifejezése nagyban leegyszerűsödik:

$$L_D = k^2 + 2L_C , \quad (2.28)$$

ahol  $k = k_\alpha = k_\beta$ .

Currie definíciója mind a mai napig széles körben elterjedt és alkalmazott meghatározásokat ad az alapvető analitikai küszöbértékekre. Két tényezője azonban van ezeknek a meghatározásoknak, amelyeken ha változtatunk, joggal várhatjuk az eredmények javulását, pl. a kimutatási határ csökkenését.

Az egyik tényező a Gauss-eloszlás feltételezése a csúcsterületre vonatkozóan. (A matematikai összefüggésekben a Gauss-eloszlás feltételezése a  $k_\alpha$ ,  $k_\beta$  tényezők használatában nyilvánul

---

(amennyiben igazak a korábbi feltevéseink) Gauss-eloszlás szerinti ingadozást mutatnak a 0 körül.

meg.) Ez a feltételezés kis beütésszámok tartományában nem feltétlenül helytálló. Mind a csatornánkénti, mind az össz-beütésszámot valószínűségi szempontból egzakt módon leíró eloszlás a binomiális eloszlás. Ennek Gauss-eloszlással való közelítése a kis beütésszámok tartományában – azaz a kimutatási határ remélt értéke körül – nem feltétlenül tehető meg elfogadható pontossággal. A kimutatási határ Gauss-eloszlás feltételezése nélkül is definiálható, Currie gondolatmenetéhez egyéb tekintetben szigorúan ragaszkodva. Ezzel kapcsolatos számításainkat ismerteti a 3.1 alfejezet.

A másik tényező Currie definíciójában, amelyen való változtatástól a kimutatási határ csökkenését reméljük, a csúcsterület meghatározásának módja. Mint korábban már volt szó róla, a definíció születésekor rendelkezésre állt technikai háttér a „csúcsterület” becslésének csak egy meglehetősen kezdetleges módját tette lehetővé: a külön mért háttér levonásával való meghatározást. Azóta erre ennél precízebb módszerek is léteznek, amelyek használatától a statisztikus hiba csökkenése, és ezáltal a kimutatási határ csökkenése is várható. Miután a kis beütésszámok tartományában a teljes valószínűségi módszer bizonyult a leghatékonyabb csúcsterület-meghatározó eljárásnak, ennek használatával bővítettük ki Currie definícióját. Az ezzel kapcsolatos vizsgálatokat a 3.2 alfejezet tárgyalja.

### 3. Kimutatási határ

#### 3.1 Az analitikai határértékek meghatározása Poisson-eloszlás feltételezésével

Ebben, és a következő alfejezetben a témával kapcsolatos saját vizsgálataink és ezek eredményei szerepelnek, melyek két közleményben [MÉR01a], [MÉR01b] jelentek meg.

A csúcsterületet továbbra is a feltételezett háttér levonásával számítjuk. A következő jelöléseket használjuk:

- $B$  a háttér aktuális (ismeretlen) értéke
- $S$  a csúcsterület aktuális (ismeretlen) értéke
- $\langle B \rangle$  a háttér várható értéke
- $\langle S \rangle$  a csúcsterület várható értéke
- $X$  a kiértékelés során eredményül kapott csúcsterület.

A háttér levonásával kapott csúcsterület:

$$X = B + S - \langle B \rangle . \quad (3.1)$$

$B + S$  a vizsgált tartományon az össz-beütésszám, ebből vonjuk le a háttér várható értékét, melyet vagy vak minta mérésével, vagy a csúcs két oldalán levő beütésszámok segítségével határozhatunk meg. (Így a háttér empirikus várható értékét kapjuk, amely azonban megfelelő meghatározási mód esetén jó becslése az elméleti várható értéknek.) Célunk azon valószínűségeknek a meghatározása, hogy a kiértékelés során a csúcsterületet 0, 1, 2, ...-nek kapjuk, a vizsgált komponenstől származó  $S$  beütésszám esetén. Ehhez tételezzük fel, hogy a háttér aktuális értéke Poisson-eloszlás szerint változhat várható értéke körül:

$$P(B) = \frac{e^{-\langle B \rangle} \langle B \rangle^B}{B!} . \quad (3.2)$$

Annak az  $S$  rögzített értékénél vett feltételes valószínűsége ezek után, hogy a háttér levonása után a nettó csúcsterület éppen  $X$  legyen, megegyezik annak a megfelelő feltételes valószínűségével, hogy a háttér aktuális értéke  $B = \langle B \rangle + X - S$ :

$$P(X | S) = P(\langle B \rangle + X - S | S) = \frac{e^{-\langle B \rangle} \langle B \rangle^{\langle B \rangle + X - S}}{(\langle B \rangle + X - S)!} . \quad (3.3)$$

A  $P(X | S)$  valószínűség a  $X$  eredmény előfordulásának valószínűsége  $S$  rögzített értéke mellett. Ezek a valószínűségek minden egyes lehetséges  $X$  értékre kiszámíthatók. ( $X$  lehetséges értékei nem feltétlenül esnek egybe a fizikailag lehetséges csúcsterület-értékekkel, ha a csúcsterület meghatározására ezt a módszert használjuk. Abban az esetben például, ha  $\langle B \rangle > B$  és  $S$  kicsi,  $X$  negatív értékeket is felvehet. Ugyanígy, ha  $\langle B \rangle < B$  és  $S$  nagy, a 3.3 egyenlet és a Poisson-eloszlás tulajdonságai miatt  $X$ -nek  $(S - \langle B \rangle)$ -nél kisebb értékei 0 valószínűségűek.

Valójában a vizsgált komponenstől származó beütések száma nem fix érték, hanem várható értéke körül szórhat azonos körülmények között elvégzett mérések során. A háttérhez hasonlóan  $S$ -et is Poisson-eloszlásúnak feltételezzük:

$$P(S) = \frac{e^{-\langle S \rangle} \langle S \rangle^S}{S!} . \quad (3.4)$$

Azon két esemény egyidejű bekövetkezésének valószínűsége, hogy a vizsgált mintaösszetevőtől származó beütések száma éppen  $S$ , és a kapott spektrumrészlet kiértékelésekor a csúcs területét  $X$ -nek találjuk, a fenti  $P(X | S)$  és  $P(S)$  valószínűségek szorzata.

Ugyanazt az  $X$  értéket többféleképpen megkaphatjuk az aktuális  $S$  és  $B$  értékektől függően: adott háttér várható érték mellett minden olyan esetben ugyanarra az eredményre jutunk, amelyben a  $B+S$  összeg azonos (ld. 3.3 egyenlet). Ezért ahhoz, hogy megkapjuk az  $X$  valószínűségeloszlását leíró végső összefüggést, a  $P(X | S) \cdot P(S)$  valószínűségeket összegezni kell  $S$  minden olyan értékére, melyre az adott  $X$  esetén a  $\langle B \rangle + X - S$  kifejezés nemnegatív értéket vesz fel, tehát az  $S = 0, 1, 2, \dots, \langle B \rangle + X$  értékekre:

$$P(X | \langle S \rangle) = \sum_{S=0}^{\langle B \rangle + X} P(S) \cdot P(X | S) = \sum_{S=0}^{\langle B \rangle + X} \frac{e^{-\langle B \rangle - \langle S \rangle} \langle S \rangle^S \langle B \rangle^{\langle B \rangle + X - S}}{S! (\langle B \rangle + X - S)!} . \quad (3.5)$$

Megjegyzendő, hogy  $X$  valószínűségeloszlása nem Poisson-eloszlás, mivel az 1. egyenlet szerint  $X$ -et két Poisson-eloszlású mennyiség különbségként kaptuk. A Poisson-eloszlás várható értéke és szórása közötti szoros összefüggésből adódóan Poisson-eloszlású változók különbsége nem lehet Poisson-eloszlású. Az analitikai határértékek Currie általi levezetésén tehát nem annyiban változtattunk, hogy a Gauss-eloszlás feltételezéséről Poisson-eloszlás feltételezésére tértünk át, hanem hogy a nettó csúcsterület eloszlására nézve semmilyen feltételezéssel nem éltünk, csupán az össz-beütésszámok Poisson-eloszlását használtuk ki.

#### *Kimutatási határ*

A kritikus szint és a kimutatási határ Gauss-eloszlás helyett a fenti  $P(X | \langle S \rangle)$  eloszlás használatával Currie gondolatmenetével teljesen analóg módon definiálható.  $\alpha$ -val ill.  $\beta$ -val jelölve az első- ill. másodfajú hiba valószínűségét, a kritikus szint az a legkisebb  $L_C$  érték, amelyre teljesül a következő összefüggés:

$$\sum_{X=L_C}^{\infty} P(X | 0) \leq \alpha . \quad (3.6)$$

A kimutatási határ ezután  $L_C$  felhasználásával definiálható: értéke megegyezik a legkisebb olyan  $\langle S \rangle$  értékkel, amelyre:

$$\sum_{X=-\langle B \rangle}^{L_C} P(X | \langle S \rangle) \leq \beta . \quad (3.7)$$

A kritikus szint itt is, mint az eredeti definícióban egy konkrét, már elvégzett mérést jellemez: a vizsgált mintaösszetevő valódi mennyisége rögzített (még hozzá 0),  $L_C$  értéke csak a kiértékeléstől, ill.  $\alpha$ -tól függ. A kimutatási határ ezzel szemben továbbra is a módszer

jellemzi: a kérdéses komponens valódi mennyisége változik a 3.7 összefüggésben leírtaknak megfelelően.

### *Minőségi analízis*

Ebben a részben alsó és felső határt próbálunk adni a vizsgált mintaösszetevő mennyiségére a csúcsterületre kapott eredmény(ek) alapján. Természetesen csak abban az esetben van értelme mindkét határértéket megadni, ha a kiértékelés során kapott csúcsterület nem kisebb, mint a kritikus szint. Amennyiben ez nem teljesül, a mintaösszetevő mennyiségére csak felső határ – becslést tehetünk.

Ha a csúcsterületet Gauss-eloszlásúnak tekintjük, az alsó és felső határértékek, azaz a konfidenciaintervallum végpontjai a Gauss-eloszlás szimmetriatulajdonságai miatt könnyen megadhatók. Amennyiben azonban – mint esetünkben is – a csúcsterületet valamilyen aszimmetrikus valószínűségeloszlással írjuk le, a konfidencia-intervallumok meghatározási módja nem egyértelmű. Az idevágó szakirodalom a módszerek széles skáláját tárgyalja Neyman klasszikus definíciójától [NEY37] a Bayes-elméletet is felhasználó új eredményekig [WEI98]. Feldman és Cousins munkájukban [FEL98] a különböző módszerek egy összehasonlító áttekintését adják.

Az alsó és felső analitikai határértékek kiszámításakor két kérdésre kerestük a választ vizsgálatainkban:

1. A kiértékelés során kapott  $X$  csúcsterület milyen minimális értéke esetén állíthatjuk adott megbízhatósági szint mellett, hogy  $\langle S \rangle$  adott alsó határ fölött van?
2. A kiértékelés során kapott  $X$  csúcsterület milyen maximális értéke esetén állíthatjuk adott megbízhatósági szint mellett, hogy  $\langle S \rangle$  adott felső határ alatt van?

Jelöljük  $L$ -l a (felső, vagy alsó) analitikai határértéket,  $L_1$ -gyel, ill.  $L_2$ -vel pedig  $X$ -nek a fenti két kérdésnek eleget tevő szélsőértékeit  $L$  valamely konkrét értéke mellett. Képezzük a  $P(\langle S \rangle | X)$  inverz valószínűségeket a következő módon:

$$P(\langle S \rangle | X) = \frac{P(X | \langle S \rangle)}{\sum_{J=0}^{\infty} P(X | J)} . \quad (3.8)$$

A nevezőben szereplő összeg tagjai  $J$  csúcsterület várható érték mellett  $X$  eredményre jutás valószínűségét jelentik. Valójában  $\langle S \rangle$ , ill. a  $J$  változó nem csak egész értékeket vehet fel, de nem jelent számottevő elhanyagolást, ha a számolásnál csak egész értékeiket vesszük figyelembe. A 3.8 összefüggés a Bayes-tételből származik, azon feltételezés felhasználásával, hogy a  $P(J)$  valószínűségek  $J$  minden értékére megegyeznek.

A  $P(\langle S \rangle | X)$  értékek ismeretében nem jelent problémát a fent megfogalmazott két kérdésre választ adni.  $L_1$   $X$ -nek az a legkisebb értéke, amelyre teljesül, hogy

$$\sum_{J=L}^{\infty} P(J | X) \geq \gamma . \quad (3.9)$$

$L_2$  pedig  $X$ -nek az a legnagyobb értéke, amelyre teljesül, hogy

$$\sum_{J=0}^L P(J | X) \geq \gamma , \quad (3.10)$$

ahol  $\gamma$  annak valószínűsége, hogy helyes a döntés, miszerint  $\langle S \rangle > L$  az első esetben, ill.  $\langle S \rangle < L$  a másodikban.

### *Mennyiségi analízis*

A mennyiségi meghatározás alapkérdése a következő: amennyiben  $X$  csúcsterületet kaptunk a kiértékelés során, mi annak a valószínűsége, hogy a vizsgált mintaösszetevőtől származó beütések száma  $S_0$  egy bizonyos környezetébe esik? ( $S_0$  a  $P(J | X)$  függvény maximumhelyét jelöli). Ezt a környezetet gyakran választjuk  $[S_0 - \sigma, S_0 + \sigma]$ -nak, ahol  $\sigma$  a mért csúcsterület szórása az adott körülmények között.

A kérdést megint érdemes átfogalmazni: a számolt  $X$  csúcsterület milyen értéke mellett mondhatjuk egy adott megbízhatósággal, hogy  $\langle S \rangle$   $S_0$ -nak egy bizonyos környezetébe esik?

A választ megint csak a  $P(\langle S \rangle | X)$  értékek segítségével adhatjuk meg. Azokat az alsó, ill. felső  $X_1, X_2$  határokat keressük, amelyekre teljesül, hogy



$$\sum_{J=S_0-\sigma}^{S_0+\sigma} P(J | X) \geq \gamma , \quad (3.11)$$

amennyiben  $X_1 \leq X \leq X_2$ .  $\gamma$  itt is a helyes következtetés valószínűségét jelöli.

Egy adott megbízhatósági határ mellett a 3.11 egyenlőtlenségnek csak akkor létezik megoldása, ha  $S_0$  egy adott határértéket meghalad, amely határ a mennyiségi analízis lehetőségességének alsó hataraként funkcionál.

### 3.2 Az analitikai határértékek meghatározása a teljes valószínűségi módszerrel

Minden olyan esetben, amikor a keresett paraméter lehetséges értékeire kapott eloszlás aszimmetrikus, a minőségi, és mennyiségi analízis kérdéseire nehéz egzakt választ adni. Az előző alfejezet az inverz valószínűség sokat vitatott fogalmát használta fel erre a célra. Amennyiben a teljes valószínűségi módszert alkalmazzuk a csúcsterület meghatározására, ezek a kérdések jóval egyszerűbben és korrektebben megválaszolhatók.

A kimutatási határ definiálását viszont a teljes valószínűségi módszer használata egyáltalán nem könnyíti meg (viszont az értékét csökkenti, mint azt látni fogjuk). A problémát az okozza, hogy míg a kimutatási határ mindig egy eljárást jellemez, addig a teljes valószínűségi módszerrel konkrét spektrumrészletek kiértékelése végezhető el. Mielőtt azonban ezen probléma megoldásáról szó esne, tekintsük először a minőségi és mennyiségi analízis jóval egyszerűbben megválaszolható kérdéseit.

#### *Minőségi analízis*

A minőségi analízisnek a teljes valószínűségi módszer esetére átfogalmazott két kérdése így hangzik:

1. Mi a valószínűsége annak, hogy a vizsgált mintaösszetevőtől származó beütések száma kisebb, mint  $L$ ?
2. Mi a valószínűsége annak, hogy a vizsgált mintaösszetevőtől származó beütések száma nagyobb, mint  $L$ ?

Erre a (két) kérdésre a módszer által szolgáltatott  $P(X)$  eloszlás ismeretében könnyű válaszolni:

$$P_1 = \sum_{X \leq L} P(X), \quad \text{ill.} \quad (3.12)$$

$$P_2 = \sum_{X \geq L} P(X) \quad (3.13)$$

a keresett két valószínűség.

#### *Mennyiségi analízis*

Ebben az esetben maga a  $P(X)$  eloszlás tekinthető a mennyiségi analízis eredményének, mivel közvetlenül kiolvasható belőle egy adott intervallumba esés valószínűsége. Az előző alfejezet jelöléseivel az  $[S_0 - \sigma, S_0 + \sigma]$  intervallumba esés valószínűsége

$$\sum_{X=S_0-\sigma}^{S_0+\sigma} P(X) \geq \gamma . \quad (3.14)$$

$S_0$  itt az az aktuális csúcsterület, amelyre a  $P(X)$  függvénynek maximuma van.

### *Kimutatási határ*

A jelölések néhány esetben el fognak térni a 3.1 alfejezet jelöléseitől, pl.: az itt előforduló  $P_{\langle S \rangle}(X)$  mennyiség a 3.1 alfejezet  $P(X | \langle S \rangle)$  mennyiségével analóg. Az eltérő jelölést az eltérő fogalmi háttér indokolja: míg a 3.1 alfejezetben a 3.1 egyenlet szoros összefüggést állapít meg az  $\langle S \rangle$  és  $X$  mennyiségek között, addig a teljes valószínűségi módszer alkalmazása esetén ez az összefüggés lazább, és nem is fogalmazható meg ilyen explicit módon. (Természetesen  $\langle S \rangle$  és  $X$  itt sem függetlenek egymástól, különben a módszer nem volna alkalmas csúcsterület-meghatározásra.)

Mint már fentebb utaltam rá, a kimutatási határ kiszámítása a teljes valószínűségi módszer alkalmazása mellett nehézségekbe ütközik. A teljes valószínűségi módszerrel kapott csúcsterület-eloszlás ugyanis erősen függ a konkrét spektrumrészlettől (a képletben szereplő csatornánkénti beütésszámértékeken keresztül) így nem alkalmas közvetlenül a mérő-kiértékelő módszer jellemzésére. A probléma áthidalására a következő eljárást alkalmazhatjuk:

Nagy számú olyan spektrumrészlet kiértékelését végezzük el, amelyeknél a háttér várható értéke megegyezik, az aktuális csúcsterület pedig 0. Az eredményül kapott  $P_0(X)$  eloszlásokat pedig átlagoljuk  $X$  minden egyes értéke esetén, azaz az összes spektrumrészlet kiértékeléséből vesszük az ugyanazon  $X$  csúcsterülethez tartozó valószínűségeket, és ezek átlagát képezzük. Ezt az eljárást elvégezve minden  $X$  csúcsterületre, végeredményül egy  $\overline{P}_0(X)$  átlagos eloszlást kapunk, amely megadja annak valószínűségét, hogy a kiértékelés során a csúcsterületet  $X$ -nek találjuk, holott az valójában 0. Ez az eloszlás alkalmas a kritikus szint megállapítására: azt a legkisebb  $L_C$  értéket tekintjük kritikus szintnek, amelyre teljesül az alábbi összefüggés:

$$\sum_{X=L_C}^{\infty} \overline{P}_0(X) \leq \alpha , \quad (3.15)$$

ahol  $\alpha$  továbbra is az elsőfajú hibának a felhasználó által megszabható értéke.

A kimutatási határ meghatározásához ezután az előbbihez hasonló módon  $\overline{P}_{\langle S \rangle}(X)$  átlagos eloszlásokat számolunk, adott háttér várható érték és adott  $\langle S \rangle$  csúcs várható érték mellett. Az

a legkisebb  $\langle S \rangle$  érték tekinthető kimutatási határnak (a 3.15 összefüggésből nyert  $L_C$  érték felhasználásával), amely esetén teljesül a következő összefüggés:

$$\sum_{X=0}^{L_C} \bar{P}_{\langle S \rangle}(X) \leq \beta, \quad (3.16)$$

ahol  $\beta$  a másodfajú hiba valószínűsége.

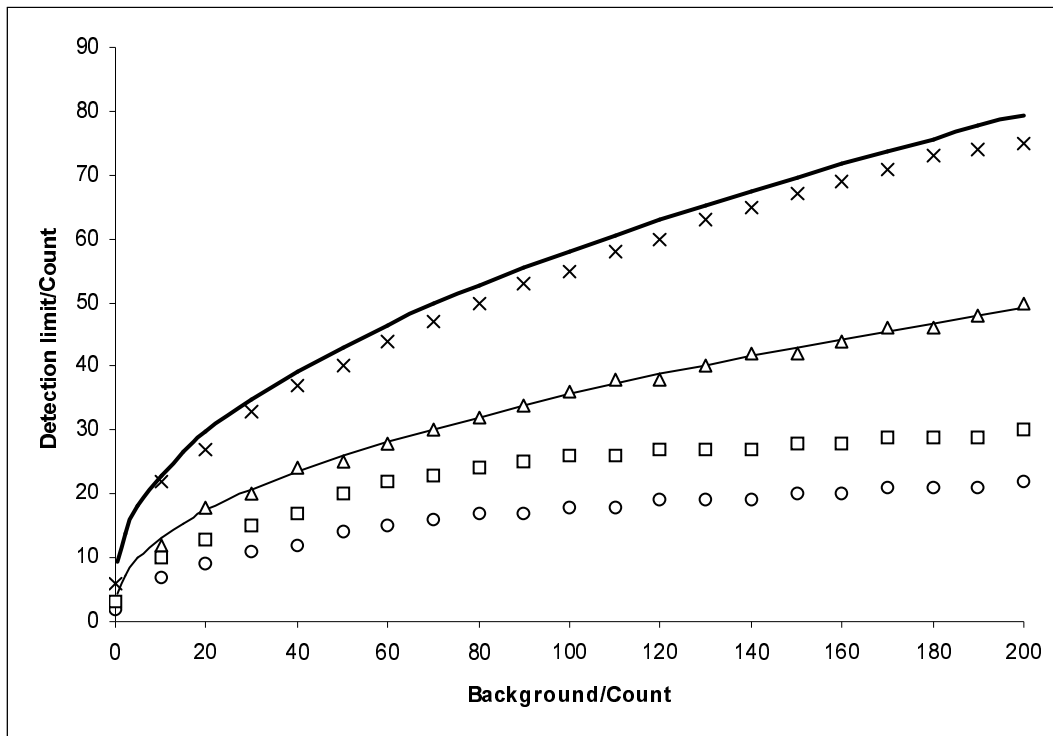
A kimutatási határ kiszámításához a fent leírt módszer szerint nagy mennyiségű spektrumrészlet kiértékelésére volt szükség. Miután mind a háttér, mind a tényleges csúcsterület várható értéke pontosan ismert, és általunk megadható kellett legyen, ezért szimulált spektrumrészletek kiértékelését végeztük el a teljes valószínűségi módszerrel.

A szimuláció a 2.2 alfejezetben leírt általános elvek szerint történt. Mind a csúcs, mind a háttér Poisson-eloszlású valószínűségi változó konkrét értékeként adódott, az eloszlás várható értékének megadása után. A csúcs alakját egy  $m = 5$  és  $\sigma = 1$  paraméterekkel rendelkező Gauss-görbe írta le, a szimulált spektrum-tartomány 10 csatorna szélességű volt.

Első lépésben 1000 darab háttérrel szimuláltunk és értékeltünk ki a kritikus szint meghatározása céljából. (Tekintve, hogy a Poisson-eloszlás várható értéke és szórása között szoros összefüggés van, a csúcs várható értékének 0 volta miatt az aktuális érték is 0 volt.)

Ezután a csúcs várható értékét egyesével növelve és az így létrehozott spektrumrészleteket kiértékelve meghatároztuk a  $\bar{P}_{\langle S \rangle}(X)$  átlagos eloszlásokat, majd ezek segítségével a kimutatási határt.

A különböző módszerekkel számolt kimutatási határ értékeket a háttér várható értékének függvényében a 3.1 ábra mutatja be. Folytonos vonal jelöli a Currie által megadott 2,28 összefüggés alapján számolt értékeket. Az alsó görbe esetén az első- és másodfajú hiba értéke 0,05 volt, a felsőnél pedig 0,005. (Az ezekhez tartozó  $k_\alpha = k_\beta$  értékek 1,646 az előbbi esetben, és 2,575 az utóbbiban.)



3.1 ábra. Kimutatási határ, a háttér nagyságának függvényében

A Gauss-eloszlás feltételezése nélkül, de a csúcsterületet továbbra is a háttér egyszerű levonásával meghatározva a  $\Delta$ -gel jelzett eredményeket kaptuk az első- és másodfajú hiba 0,05-nak ill. az  $\times$  jelűeket a hibák 0,005-nek választott értéke mellett. A teljes valószínűségi módszer használatával kapott kimutatási határ értékeket a  $\circ$  ill.  $\square$  jelek mutatják az ábrán, az első- és másodfajú hiba előbbi értékei mellett.

A Poisson-eloszlás használatával kapott eredményeink érdekes módon nem térnek el jelentősen a Currie által kapott eredményektől. Az első- és másodfajú hibák szokásosan használt 0,05-os értéke mellett egyáltalán nem tapasztalható eltérés. Amennyiben nagy megbízhatóságra törekszünk, és a hibáknak ennél csak egy nagyságrenddel kisebb értéket engedünk meg, a Poisson-eloszlás használatával számított kimutatási határ valamivel alacsonyabb, mint a Currie összefüggése által meghatározott érték.

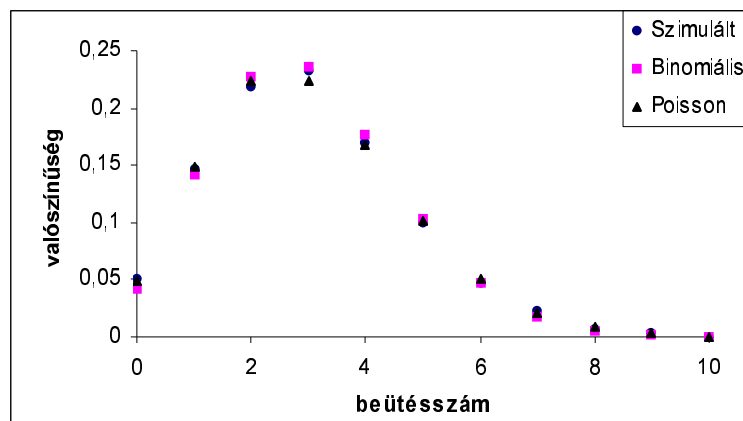
A teljes valószínűségi módszer alkalmazásával viszont az előbbieknél jóval alacsonyabb kimutatási határ értékekhez juthatunk az első- és másodfajú hibák bármely értéke mellett. Ez nem meglepő, miután ez a módszer a spektrumban tárolt információ mennyiségéből jóval többet használ fel, mint a háttérlevonásos csúcsterület-meghatározó eljárás.

#### 4. Szimulált spektrumok kiértékelése

A 2.2 alfejezetben leírt általános elveknek megfelelően 1000 darab, 10 csatornából álló, darabonként egy csúcsot és háttérrel tartalmazó spektrumrészletet hoztunk létre számítógépes szimulációval. A háttérrel és a csúcsot külön-külön szimuláltuk, majd a kapott eredményeket csatornánként összeadva jutottunk a megfelelő spektrumrészletekhez. A szimulációkban a háttér a csatornában ugyanazon várható érték körül Poisson-eloszlás szerint szórt, míg a csúcs beütésszáma rögzített volt, a beütések csatornábeli eloszlását pedig Gauss-eloszlás írta le, a 2.2 alfejezetben leírtaknak megfelelően.

Az 1000 darab spektrumrészletben a háttér várható értéke a 10 csatornából álló tartományon az esetek egyik felében 30, a másik felében 60 volt. Az 500-500 ilyen háttéren 0, 5, 10, 15, ill. 20 beütésszámú csúcsok helyezkedtek el. Így a szimulált spektrumok 100-anként voltak egyformák olyan értelemben, hogy azonos háttér várható érték és azonos csúcs-beütésszám tartozott hozzájuk. Ez természetesen nem jelenti azt, hogy bármely kettő közülük teljesen megegyezett volna.

A kiértékelés megkezdése előtt a szimulált adatok ellenőrzésére is sor került. Ez egyrészt a csatornánkénti háttér-beütésszámok valószínűségeloszlásának ellenőrzésére, másrészt a csúcs-beütésszámok csatornába való szétosztásának ellenőrzésére terjedt ki. A 2.2 alfejezetben leírtaknak megfelelően a csatornába egyenletesen szétosztott háttér-beütésszámok binomiális eloszlást követnek. 30-as összebeütésszám és 10 csatorna esetén ez csatornánként 3 várható értékű binomiális eloszlásnak felel meg. A 4.1 ábrán az 1000 darab csatornánkénti beütésszám empirikus eloszlása, az  $N = 30$  és  $p = 0,1$  paraméterű binomiális eloszlás, ill. a  $\lambda = 3$  paraméterű Poisson-eloszlás képe látható.

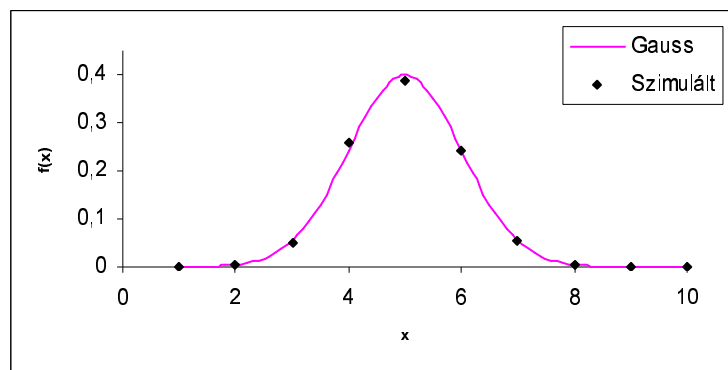


4.1 ábra. A szimulált adatok empirikus eloszlásának összehasonlítása a binomiális és a Poisson-eloszlással

Az ábra tanúsága szerint egyrészt a szimulált, ill. az elméletileg várt értékek jó egyezést mutatnak, másrészt pedig a paraméterek ilyen értékei mellett a csatornánkénti háttér-beütésszámok jó közelítéssel Poisson-eloszlásúnak tekinthetők.

A csúcs-beütésszám csatornába való szétoztásánál a csúcs alakját  $m = 5$  várható értékű, és  $\sigma = 1$  szórájú Gauss-görbe írta le. (A Neumann-féle céltábla-módszernél használt téglalapról ebben az esetben a Gauss-görbe  $6,82 \cdot 10^{-9}$ -ed része hiányzott, ami a szimulációban gyakorlatilag nem okozott torzulást.)

A 2.2 ábrán látható a szimuláció ellenőrzése. Folytonos vonal jelöli a megfelelő Gauss-görbét, pontok a szimulált értékek csatornánkénti összegét 1000 darab szimulált csúcs esetén.



4.2 ábra A szimulált adatok empirikus eloszlásának összehasonlítása a Gauss-eloszlással

## 4.1 A kiértékelés általános elvei

Az előzőekben leírt módon szimulált spektrumokat a teljes valószínűségi módszernek, a legkisebb négyzetek módszerének és a maximum likelihood elvnek az összehasonlítására használtuk, spektrumok kiértékelésénél mutatott hatékonyságuk szempontjából.

### 4.1.1 Kiértékelés a legkisebb négyzetek módszerével

A háttérhez konstans függvényt, a csúcsokhoz Gauss-görbét illesztettünk, azaz a modellfüggvény minden esetben



$$f(i) = A \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \cdot e^{-\frac{(i-m)^2}{2\sigma^2}} + B \quad (4.1)$$

alakú volt, ahol a Gauss-sűrűségfüggvény  $m$  és  $\sigma$  paraméterei megegyeztek a szimulációnál csúcs-alaknak használt Gauss-görbe megfelelő paramétereivel, azaz  $m = 5$  és  $\sigma = 1$ ;  $A$  és  $B$  az illesztendő paraméterek,  $A$  a csúcsterület,  $B$  a háttér csatornánkénti értéke,  $i$  pedig egész értékeket vehetett fel 1 és 10 között, a csatornáknak megfelelően.

Mért spektrumok kiértékelésénél általában nem maga a csúcsterület az illesztendő paraméter, hanem külön a csúcs magassága és szélessége. Mivel azonban egyrészt a szimulált spektrumok kevésbé bonyolultak, mint a valódiak, másrészt pedig az összehasonlításban részt vevő többi módszer is közvetlenül a csúcsterület becsült értékét szolgáltatja eredményül, ezért ennél a módszernél is magát a csúcsterületet illesztettük.

A minimalizálandó  $\chi^2$ -függvény alakja a szimulált  $y_i$  csatornatartalmakkal:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{10} \frac{(y_i - f(i))^2}{y_i} \quad (4.2)$$

A  $\chi^2$ -függvény minimumát az  $A$  és  $B$  paraméterek szerinti parciális deriváltjaiból képzett alábbi egyenletrendszer megoldásaként kerestük:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi^2}{\partial A} &= \sum_{i=1}^{10} \frac{2G(i)}{y_i} (A \cdot G(i) + B - y_i) = 0 \\ \frac{\partial \chi^2}{\partial B} &= \sum_{i=1}^{10} \frac{2}{y_i} (A \cdot G(i) + B - y_i) = 0 \end{aligned} \quad (4.3a-b)$$

ahol  $G(i)$  a Gauss-sűrűségfüggvény értékét jelöli az  $i$ -edik csatornában. Az egyenletrendszer  $A$ -ra és  $B$ -re nézve lineáris, így az ritka, szerencsés eset áll fenn, amikor a minimumkeresés analitikusan elvégezhető. Az egyenletrendszer megoldása:

$$A = \frac{\sum \frac{1}{y_i} - \sum \frac{G(i)}{y_i}}{\left( \sum \frac{G^2(i)}{y_i} \right) \cdot \left( \sum \frac{1}{y_i} \right) - \left( \sum \frac{G(i)}{y_i} \right)^2} \quad (4.4a-b)$$

$$B = \frac{\sum \frac{G^2(i)}{y_i} - \sum \frac{G(i)}{y_i}}{\left( \sum \frac{G^2(i)}{y_i} \right) \cdot \left( \sum \frac{1}{y_i} \right) - \left( \sum \frac{G(i)}{y_i} \right)^2}$$

A paraméterek hibájának meghatározása a szokásos módon, a második parciális deriváltakból álló mátrix invertálásával történt. A második parciális deriváltak mátrixa a következő:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2(\chi^2)}{\partial A^2} & \frac{\partial^2(\chi^2)}{\partial A \partial B} \\ \frac{\partial^2(\chi^2)}{\partial B \partial A} & \frac{\partial^2(\chi^2)}{\partial B^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum \frac{2G^2(i)}{y_i} & \sum \frac{2G(i)}{y_i} \\ \sum \frac{2G(i)}{y_i} & \sum \frac{2}{y_i} \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Az ebből invertálással és 1/2-del való szorzással képzett kovariancia-mátrix pedig:

$$\begin{pmatrix} \sigma_A^2 & \text{cov}(A, B) \\ \text{cov}(A, B) & \sigma_B^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\left( \sum \frac{1}{y_i} \right) \left( \sum \frac{G^2(i)}{y_i} \right) - \left( \sum \frac{G(i)}{y_i} \right)^2} \begin{pmatrix} \sum \frac{1}{y_i} & -\sum \frac{G(i)}{y_i} \\ -\sum \frac{G(i)}{y_i} & \sum \frac{G^2(i)}{y_i} \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

#### 4.1.2 Kiértékelés a maximum likelihood módszerrel

A módszer Poisson-eloszlásra alkalmazott változatát használtuk a spektrumrészletek kiértékelésére. A likelihood-függvény logaritmusa, melynek minimumhelyét kerestük, a következő volt:

$$\ln L = \sum_{i=1}^{10} (-B - AG(i) + y_i \ln(B + AG(i)) - \ln(y_i!)). \quad (4.7)$$

A fenti függvénynek a két paraméter szerinti első parciális deriváltjaiból képzett egyenletek:

$$\frac{\partial \ln L}{\partial A} = \sum_{i=1}^{10} \left( -G(i) \frac{B + AG(i) - y_i}{B + AG(i)} \right) = 0, \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial \ln L}{\partial B} = \sum_{i=1}^{10} \left( -1 + \frac{y_i}{B + AG(i)} \right) = 0, \quad (4.9)$$

A legkisebb négyzetek módszerénél kapott egyenletektől eltérően ez a két egyenlet nem oldható meg  $A$ -ra és  $B$ -re analitikusan, ezért az Excel táblázatkezelő Solver nevű optimumkereső algoritmusát használtuk fel  $A$  és  $B$  optimális értékének megkereséséhez.

Érdemes megjegyezni, hogy az  $A$  szerinti parciális derivált egyenlete nem tér el nagyon a legkisebb négyzetek módszerénél kapott megfelelő egyenlettől, mintha egy konstans szorzófaktoron kívül csak annyi különbség lenne köztük, hogy itt a mérési eredmények szórásának reciproka helyett az ismeretlen, meghatározandó érték szórásának reciprokát használnánk súlyozó tényezőnek. Bár itt nem erről van szó, az egyenlet alakja mégis jelzi azt, hogy az utóbbi módszer miért szolgáltat precízebb megoldásokat. Azt is jelzi viszont, hogy ezzel a módszerrel bonyolultabb a számolás, hiszen a legkisebb négyzetek módszerénél éppen az egyszerűség miatt szokás a nevezőben a paraméterektől független mért értékek hibájával számolni. Ez az egyszerűsítés viszont a legkisebb négyzetek módszerénél az 1.2.1 alfejezetben leírtak miatt szisztematikus hibához vezet, ami a kis beütésszámok tartományában jelentőssé válik.

A paraméterek hibájának becslési eljárása ennél a módszernél nem egyértelmű. A szakirodalom – mint erről már korábban írtam – csak közelítő megoldásokat említ. Ennek oka a paraméter Gauss-tól eltérő eloszlása esetén az eloszlás aszimmetriája. A Gauss-eloszlásnál egzakt módon megadható, kb. 68%-os megbízhatósághoz tartozó  $A \pm \sigma$  intervallum helyett itt választanunk kell, hogy a meghatározott intervallumunk vagy nem lesz szimmetrikus a paraméter becsült értékére, vagy az alá- és fölébecslés valószínűségei fognak eltérni.

A kovarianciamátrix kiszámítása a legkisebb négyzetek módszerénél leírtakkal analóg módon a maximum likelihood módszer esetében is felmerült, azonban itt, (a legkisebb négyzetek módszerétől eltérően) a mátrix-elemek nem függetlenek a paraméterektől, így az optimumban vett értékük nem jellemzi jól a paraméterek hibáját. Ezen probléma áthidalására a 2.3.2 alfejezetben bemutatott két eljárás közül a másodikat alkalmaztuk. Ennél a hibaintervallum

határainak az  $\ln L$  függvény maximumánál 1/2-del kisebb értékeihez tartozó két csúcsterület-értéket tekintettük, az optimális háttérérték mellett. Az ezzel a módszerrel kapott eredmények csak közelítik a 68%-os megbízhatósághoz tartozó intervallumot. Az alá- és fölé-becslés valószínűsége azonos, viszont így az eloszlás aszimmetriája miatt az intervallum nem szimmetrikus a becsült csúcsterület-értékre.

#### 4.1.3 Kiértékelés a teljes valószínűségi módszerrel

A teljes valószínűségi módszerrel a spektrumrészleteket a 2.4 alfejezetben leírt elv szerint értékeltük ki. Az eredményeket a módszer mindkét matematikai megfogalmazásával kiszámítottuk.

##### *A számítások gyakorlati kivitelezése*

A teljes valószínűségi módszer – talán egyetlen – hátránya a görbeillesztéses eljárásokkal szemben a nagy mennyiségű elvégzendő matematikai művelet, és így a viszonylag nagy időigény. A 2.19 és a 2.22 összefüggések mindegyike egy-egy összeg, amely  $k$  darab csatorna esetén  $n_1 n_2 \dots n_k$  darab tagot tartalmaz ( $n_i$  az  $i$ -edik csatorna tartalma). Az összeadandó törteknek mind a számlálójában, mind a nevezőjében bonyolult, faktoriálisokat is tartalmazó kifejezések szerepelnek, amelyek egyrészt szintén növelik a számolási időt, másrészt olyan extrém nagy számokat tartalmazhatnak, amelyek túlsordulást okozhatnak. A számolásokat végző algoritmust ezeknek a szempontoknak a figyelembevételével kellett megírni.

Az algoritmus jelenlegi formájában egy 10 csatornából álló, kb. 50 beütést tartalmazó spektrumrészletet egy 1000 MHz-en működő, Pentium-III processzoros számítógépen futtatva néhány perc alatt értékeli ki. A programnyelvnek a jelenleginél célszerűbb megválasztásával a módszer időigénye valószínűleg még jelentősen csökkenthető lenne.

A számításokat pillanatnyilag az Excel táblázatkezelő, és egy ehhez írt „makró” végzi a következő módon: először a

$$\frac{P_i^{x_i}}{x_i!(n_i - x_i)!} \quad (4.10)$$

tényezők kiszámítása történik meg minden csatornára és  $x_i$  minden lehetséges értékére 0-tól  $n_i$ -ig. A program ezután az így képzett mátrix elemeiből előállítható

$$\prod_{i=1}^k \frac{P_i^{x_i}}{x_i!(n_i - x_i)!} \quad (4.11)$$

szorzatokat számítja ki, az összes lehetséges módon. Ezen részvalószínűségek mindegyike egy  $X$  csúcsterülethez tartozik, méghozzá ahhoz, amelyre

$$\sum_{i=1}^k x_i = X . \quad (4.12).$$

A különböző csúcsterületekhez tartozó rész-valószínűségek gyűjtése és összeadása a program futása közben, egymással párhuzamosan történik. Végül az összes rész-valószínűség kiszámítása után az egyes csúcsterületekhez tartozó valószínűségeket megszorozzuk a

$$\frac{e^{-\langle B \rangle} \cdot \langle B \rangle^{N-X}}{k^{N-X}} \quad (4.13)$$

tényezővel. Ezzel az eljárással elkerülhető az egyes rész-szorzatok többszöri, feleslegesen ismételt kiszámítása.

A 2.22 képlettel való számolásnál hasonló módszer alkalmazható.

Egyes gyakorlati alkalmazásoknál szükség lehet bizonyos egyszerűsítő feltételek bevezetésére a számolási idő csökkentése érdekében. A konkrét kiértékelési feladatok megoldása során két ilyen egyszerűsítési lehetőség került szóba.

Az egyik a szomszédos csatornák páronkénti összevonása volt. Ez jelentősen csökkentette ugyan a számolási időt, viszont a teljes információmennyiség olyan nagy részének elvesztésével járt, és emiatt az eredmények pontosságát olyan mértékben rontotta, hogy alkalmazását végül elvetettük. Az összevont csatornákkal a teljes valószínűségi módszerrel kapott eredmények nem voltak jelentősen jobbak, mint a legkisebb négyzetes görbeillesztéssel kapottak, így a teljes valószínűségi módszer használata indokolatlanná vált volna.

A másik egyszerűsítési lehetőség jobban bevált; az 5.1 alfejezetben leírt kiértékelési feladatnál is alkalmaztuk. Ez akkor használható, ha előre – anélkül, hogy kiszámítanánk – biztosak lehetünk abban, hogy valamelyik konfiguráció valószínűsége elhanyagolhatóan kicsi. Ez megfelel azoknak az eseteknek, amikor a háttér csatornánkénti várható értéke a szórásához

viszonyítva elegendően nagy. Ekkor csatornánként egy, vagy több beütést a valószínűségek fent leírt számolásakor nem veszünk figyelembe: a 4.10 kifejezések értékének kiszámításakor  $x_i$  értéke legfeljebb  $n_i - 1$  lehet (csatornánként több beütés számításán kívül hagyása esetén ez a -1 értelemszerűen módosul). Az ellenőrző vizsgálatok szerint ez az elhanyagolás a végeredményül kapott csúcsterület-eloszlásban nem okoz észrevehető változást; az eloszlás alakjának torzulását elkerülendő azonban arra ügyelni kell, hogy minden csatornában ugyanannyi beütést hagyjunk ki a számításból.

Ezen elhanyagolás nélkül a kiszámítandó rész-valószínűségek száma

$$(n_1 + 1)(n_2 + 1) \dots (n_k + 1) . \quad (4.14)$$

Mivel minden csatornában 1 beütés figyelmen kívül hagyása (a fent leírt értelemben) az előbbi szorzat minden tényezőjének 1-gyel való csökkenését eredményezi, ezért ez a típusú elhanyagolás az elvégzendő műveletek számának jelentős csökkenését vonja maga után.

Szimulált spektrumaink kiértékelésekor a 60-as háttér-beütésszámú spektrumrészletek többségénél csatornánként két, ill. egy beütést eleve a háttérhez tartozónak tekintettünk, a fent leírtaknak megfelelően. Azokban az esetekben, ahol valamelyik csatorna tartalma nem érte el a két, ill. az egy beütést, természetesen nem alkalmaztuk ezt az egyszerűsítést. (Az 500 spektrumrészlet között kb. 6-8 esetben fordult elő, hogy valamelyik csatorna egyáltalán nem tartalmazott beütést, míg az 1 beütés kb. 30-40 esetben fordult elő).

A kiértékelések végeredményül a 2.1 ábrán bemutatotthoz hasonló csúcsterület-eloszlási görbéket kaptuk.

A teljes valószínűségi módszer alapkoncepciójával ellentétes az eredmények becült érték  $\pm$  becült hiba megadási módja. Eszerint a teljes csúcsterület-eloszlások felírása sokkal árnyaltabb módja a spektrumrészletek kiértékelésének, mivel a megadott hibaintervallumon belül nem azonos az egyes csúcsterületek valószínűsége. Amennyiben Gauss-eloszlás helyett valamilyen aszimmetrikus eloszlással írhatók le a paraméterek, ez még fokozottabban igaz.

Arra a célra azonban, hogy a teljes valószínűségi módszert összehasonlítsuk a legkisebb négyzetek módszerével ill. a maximum likelihood módszerrel, az eredményeket az ezekéhez

hasonló módon kell megadnunk. A csúcsterületnek a teljes valószínűségi módszerrel becsült értékét ezért az eloszlási görbe maximumhelyével azonosítottuk.

A teljes valószínűségi módszernél nem csak az előbbieken leírtak miatt volt nehéz a többi módszerével összehasonlítható hibabecslési eljárást találni. Ennél a módszernél a háttér becslése is eltér a szokásostól. A 2.4 alfejezetben leírt 2.19 képlet használata esetén a háttér várható értéke a módszertől függetlenül kerül meghatározásra, így az eredmények a háttér statisztikus hibáját nem tartalmazzák teljes mértékben. A 2.22 összefüggés viszont impliciten tartalmazza a háttér várható értékének meghatározását is, így az ezzel kapott csúcsterületek hibája nem független a háttér bizonytalanságától.

Az előbbi két mondat talán részletesebb magyarázatra szorul. A teljes valószínűségi módszernél a háttér és a csúcsterület valójában nem két paraméter, mivel a 2.16 feltétel miatt a csúcshoz rendelt csatornánkénti beütésszámok értéke egyértelműen megszabja a háttérhez rendelt csatornánkénti beütésszámok értékét. Ezért, míg a legkisebb négyzetek módszerénél és a maximum likelihood módszerénél a célfüggvény kétdimenziós, addig a teljes valószínűségi módszerrel kapott csúcsterület-eloszlás egydimenziós. Ezen eloszlás "szélessége", bár a csúcsterület hibájával hozzuk összefüggésbe, tartalmazza a háttér meghatározásának hibáját is – legalábbis a 2.22 összefüggés használata esetében. A 2.19 összefüggés alkalmazása mellett is igaz ez bizonyos mértékben, hiszen a háttérnek itt is csak a várható értéke rögzített, az e körüli ingadozás megengedett. Kétségtelen tény azonban, hogy a háttér várható értékének meghatározásakor jelenlevő bizonytalanságot a módszer ezen változata nem tartalmazza.

A csúcsterület hibájának számításánál a 3.2 alfejezetben leírt intervallumba esés valószínűségének meghatározási módszerét használtuk. Mivel az eredményül kapott eloszlás diszkrét értékekből áll, nem lehetett pontosan a 68%-os megbízhatósághoz tartozó intervallumot meghatározni, ezért az ezzel kapott eredmények csak közelítő pontosságúak.

A kb. 68%-os konfidenciához tartozó intervallum-határokat a következőképpen állapítottuk meg: a csúcsterület-eloszlás „két végéről” elindulva összeadtuk az egyes csúcsterületekhez tartozó valószínűségeket addig, amíg mindkét oldalon éppen meg nem haladta ez az érték a 0,16-ot. Az a két csúcsterület, amelyhez az utolsóként hozzáadott két valószínűség tartozott, egy, a 68%-osnál kisebb megbízhatósági intervallumot határozott meg, míg az alsó határnál eggyel kisebb, a felsőnél eggyel nagyobb csúcsterületértékek a 68%-osnál nagyobbak. A kettő átlagát tekintettük a 68%-os megbízhatósághoz tartozó intervallum közelítő értékének. Az így

megállapított intervallumok természetesen nem voltak szimmetrikusak a csúcsterület becsült értékére.

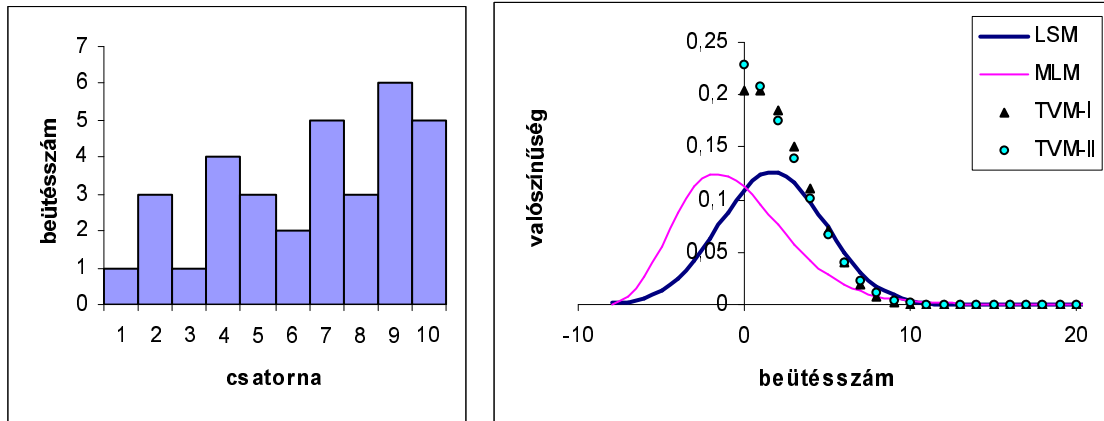
## 4.2 Az eredmények értékelése

Mindhárom módszerrel kiszámítottuk az 1000 szimulált csúcs területét. Ez egyedül a legkisebb négyzetek módszerénél ütközött akadályba az esetek egy részében: azokban az esetekben, amikor a 10 csatornás spektrumrészlet valamelyik csatornájának tartalma 0 volt, a csúcsterület négyzetgyökének reciprokával nem lehetett súlyozni. Felmerült a csatornatartalom korrekciójának lehetősége ezekben az esetekben; az 1-gyel való növelés azonban a kis beütésszámok miatt nagyon megmászotta volna az eredményeket, az egy-két tizeddel való növelés pedig nem bizonyult elegendőnek a  $\chi^2$ -függvény megfelelő határok közé szorításához. Emiatt a 0 csatornatartalmat tartalmazó spektrumrészleteket a legkisebb négyzetek módszerével való kiértékelésből kihagytuk. Az ilyen esetek száma a 30-as össz háttér-beütésszámú spektrumrészleteknél 150 volt, míg a 60-as háttérűeknél mindössze 3.

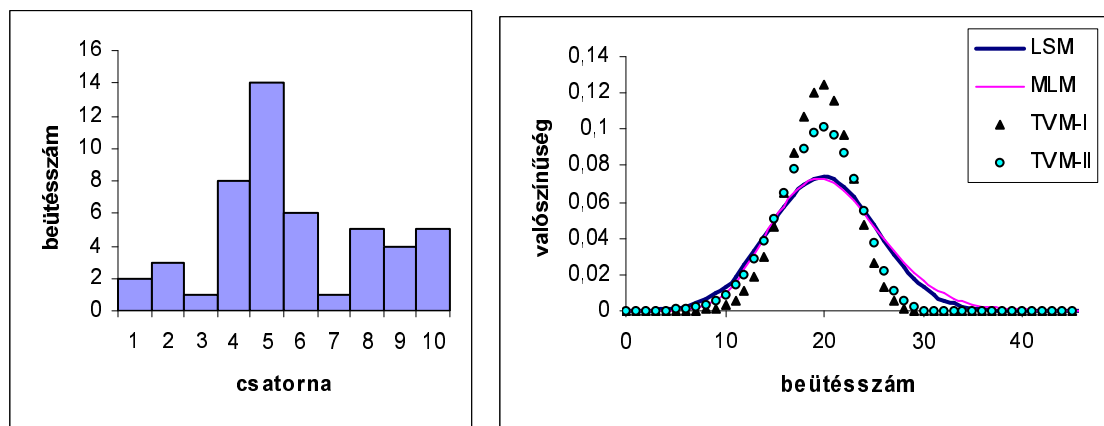
Ezenkívül egy probléma merült még fel a csúcsterületek becsült értékének meghatározásánál: azokban az esetekben, amikor a háttérhez nem adtunk csúcsot, azaz a valódi csúcsterület 0 volt. Itt a hagyományos módszerek és a teljes valószínűségi módszer eltérő elvi állásfoglalást képviseltek: míg az előbbieket 0-nál kisebb csúcsterületet is adhattak végeredményül, addig az utóbbinál ez nem volt lehetséges. Így a legkisebb négyzetek módszere és a maximum likelihood módszer az esetek egy részében fizikailag lehetetlen eredményt adtak, viszont átlagban az eredményeik viszonylag jól közelítették a 0-t, míg a teljes valószínűségi módszerrel kapott eredmények átlaga kissé 0 fölé esett. Azt, hogy e két hiba közül melyik a kevésbé kívánt, a konkrét felhasználás dönti el.

Szemléltetésül következzen három ábra három szimulált spektrumrészletről, ill. a különböző módszerekkel való kiértékelésük eredményéről.

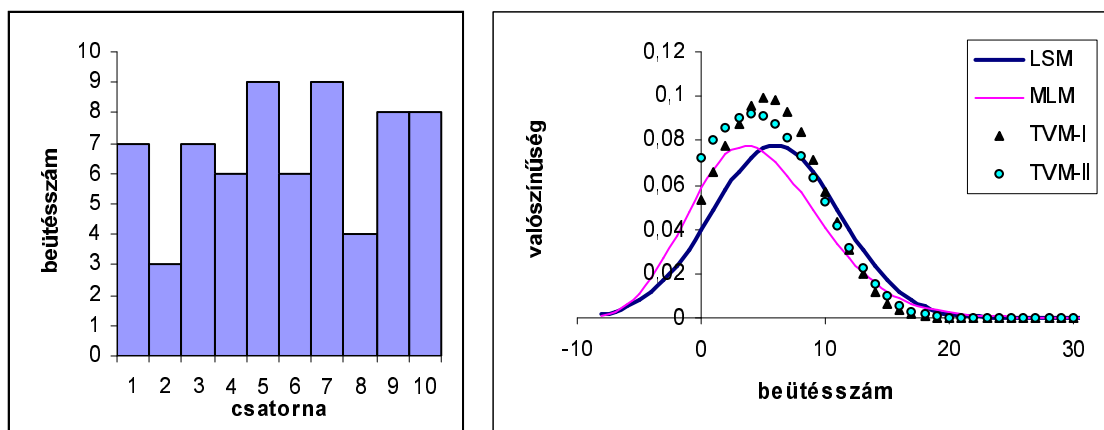




4.1a ábra. 30-as háttér várható értékű, és 5-ös csúcsterületű szimulált spektrumrészlet (baloldalt), és kiértékelésének eredménye az egyes eljárásokkal (jobbaldalt)



4.1b ábra. 30-as háttér várható értékű, és 20-as csúcsterületű szimulált spektrumrészlet (baloldalt), és kiértékelésének eredménye az egyes eljárásokkal (jobbaldalt)



4.1c ábra. 60-as háttér várható értékű, és 5-ös csúcsterületű szimulált spektrumrészlet (baloldalt), és kiértékelésének eredménye az egyes eljárásokkal (jobbaldalt)

A spektrumrészletek 100-anként voltak azonos csúcsterületűek és háttér várható értékűek. 100 elemből álló minta esetén még túl nagyok a statisztikus fluktuációk ahhoz, hogy messzemenő

következtetéseket lehessen levonni az eredményekből; a következő táblázat ezért inkább csak tájékoztató jellegű, a részeredményeket közli.

A 4.1 táblázat az azonos csúcsterületű spektrumrészletekre vonatkozik, így az egyes cellákban 200-200 eredmény átlaga található. Az első oszlopban vannak feltüntetve a tényleges csúcsterületek. A 2-5. oszlopok tartalmazzák az egyes módszerekkel kapott becült csúcsterület-értékek átlagát (LNM: legkisebb négyzetek módszere, MLM: maximum likelihood módszer, TVM-I: teljes valószínűségi módszer, 2.19 képlet, TVM-II: teljes valószínűségi módszer, 2.22 képlet). A 6-7. oszlopban a 200 esetből azoknak a száma látható, amelyeknél a legkisebb négyzetek módszere, ill. a maximum likelihood módszer negatív csúcsterületet szolgáltatott eredményül (A becült csúcsterületek átlagába ezek az eredmények is beleszámítottak.) Az utolsó oszlop azon esetek számát tartalmazza, amelyekben a legkisebb négyzetek módszere (0 csatornatartalom miatt) nem volt használható.

	LNM	MLM	TVM-I	TVM-II	LNM <0	MLM <0	LSM --
c=5	5,3453	4,7223	5,4450	5,3150	20	25	34
c=10	10,3613	10,2384	10,6100	10,5200	8	5	22
c=15	14,7978	14,6241	15,1100	14,8150	2	1	27
c=20	19,3534	19,4962	20,2000	19,6550	0	0	30
c=0	0,8832	0,0426	2,0550	2,0650	73	96	40

4.1 táblázat. A csúcsterület-becslés eredménye az egyes módszerekkel (átlagok)

A 0 csúcsterületet leszámítva a csúcsterület-becslés szempontjából nem mutatkozik lényeges eltérés a kiértékelési módszerek között. A tényleges csúcsterület alá- vagy fölébecslésében nem látható tendencia, az eltérések valószínűleg csak a minta kis elemszámából adódó statisztikus fluktuációt tükrözik.

A 0 csúcsterület sorában megfigyelhető, hogy a teljes valószínűségi módszer a másik kettőnél jelentősebben felülbecsli átlagban a csúcsterületet, viszont a két másik módszer az esetek igen nagy hányadában ad fizikailag értelmezhetetlen, negatív csúcsterületet eredményül.

A 4.2 táblázat az egyes módszerek által becült csúcsterületeknek a valódi értéktől való relatív eltérését mutatja be., azaz a

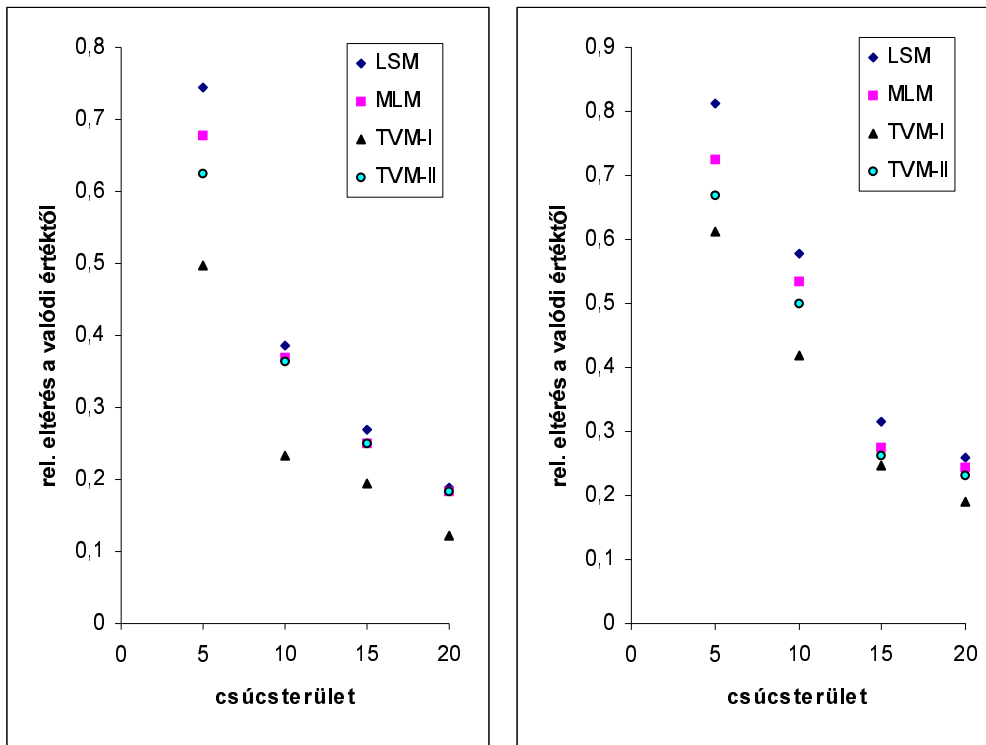
$$\frac{|c_{\text{becsült}} - c_{\text{valódi}}|}{c_{\text{valódi}}} \quad (4.15)$$

értékeket. Az első négy oszlop a 30-as, a második négy a 60-as össz háttér-beütésszámhoz tartozik. A táblázat celláiban a relatív eltéréseknek az adott sornak megfelelő 100 spektrumrészletre vett átlaga található. A 4.15 összefüggésből adódóan a 0 csúcsterületű spektrumrészleteket ebbe a vizsgálatba nem vontuk be.

		LNM	MLM	TVM-I	TVM-II
h=30	c=5	0,7443	0,6767	0,4980	0,6260
	c=10	0,3871	0,3695	0,2320	0,3630
	c=15	0,2703	0,2504	0,1933	0,2487
	c=20	0,1876	0,1843	0,1235	0,1830
h=60	c=5	0,8130	0,7265	0,6120	0,6680
	c=10	0,5792	0,5342	0,4180	0,4990
	c=15	0,3160	0,2746	0,2480	0,2613
	c=20	0,2603	0,2450	0,1895	0,2325

4.2 táblázat. A becsült csúcsterületek relatív eltérése a valódi értéktől.

A táblázat adataiból egyértelmű következtetések vonhatók le. Mielőtt azonban ezeket megtennénk, az adatokból készült ábrát is vegyük szemügyre.



4.2 ábra. A becsült csúcsterületek relatív eltérése a valódi értéktől az egyes módszereknél. A bal oldali ábra a 30-as össz háttér-beütésszámhoz, a jobboldali a 60-ashoz tartozik.

Az egyes módszerek pontossági sorrendje egyértelmű. A legnagyobb relatív eltéréssel, azaz a legpontatlanabban a legkisebb négyzetek módszere becsülte a csúcsterületet. A következő a maximum likelihood módszer volt. A legpontosabbnak pedig a teljes valószínűségi módszer bizonyult. A teljes valószínűségi módszer két változata közötti jelentős eltérés oka a háttér eltérő becslésében rejlik. Mint korábban már szó volt róla, a TVM-I esetében a háttér várható értékét a módszertől függetlenül kell meghatározni. Ebben az esetben a háttér várható értékének az általunk pontosan ismert 30-as, ill. 60-as értéket vettük. Ez természetesen ennek a módszernek "sportszerűtlen" előnyt biztosított a többi eljárással szemben, ezért lettek a TVM-I-gyel számolt eredmények jelentősen jobbakként a többinél. Azonban az ilyen jellegű előnnyel nem bíró TVM-II is jobb eredményeket szolgáltatott a két szokásos módszernél.

Nem meglepő módon a kisebb csúcsterületekhez nagyobb relatív hiba tartozik mindegyik módszer esetében, mint ahogy a háttér várható értékének növelése a relatív hiba növekedéséhez vezet. A teljes valószínűségi módszer a gyakorlatban legelterjedtebb legkisebb négyzetek módszerénél minden esetben jobb eredményt szolgáltat. Különösen rossz statisztika esetén, egészen kis beütésszámoknál, ill. nagy háttér mellett pedig a maximum likelihood

módszernél is egyértelműen jobban becsli a csúcsterületet. (Kis eltérés a teljes valószínűségi módszer javára pedig minden esetben megfigyelhető a 4.2 táblázat adatai alapján).

Az előző alfejezetben leírt megfontolások alapján elvégeztük az egyes módszerekkel becsült statisztikus hibák összehasonlítását is. Az itt kapott eredmények talán kisebb jelentőségűek, mint a becsült csúcsterület-értékek összehasonlításával kapottak, lévén a hibabecslési eljárások az egyes módszereknél különbözőek, így közvetlen összehasonlíthatóságuk megkérdőjelezhető.

A 4.3 táblázat egyes sorai az azonos háttér várható értékű és csúcsterületű csúcsot tartalmazó spektrumrészletek esetében a csúcsterületek becsült hibájának átlagait tartalmazzák. Az első két oszlopban van feltüntetve a háttér várható értéke, ill. a valódi csúcsterület. A további oszlopok az egyes kiértékelő módszerekkel meghatározott hibáknak a megfelelő 100 csúcsra számított átlagát tartalmazzák.

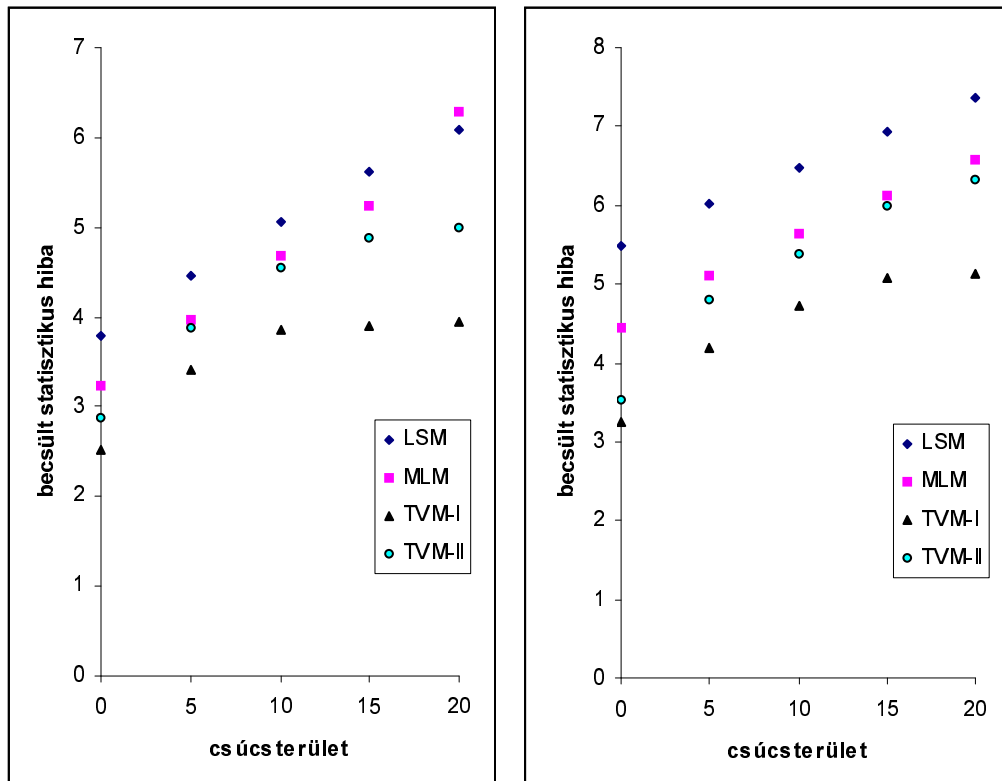
		LNM	MLM	TVM-I	TVM-II
h=30	c=0	3,7914	3,2420	2,5200	2,8700
h=30	c=5	4,4661	3,9785	3,4200	3,8800
h=30	c=10	5,0538	4,6910	3,8500	4,5450
h=30	c=15	5,6126	5,2300	3,9100	4,8900
h=30	c=20	6,0919	6,2775	3,9450	4,9950
h=60	c=0	5,4981	4,4495	3,2500	3,5250
h=60	c=5	6,0201	5,1160	4,1800	4,7900
h=60	c=10	6,4768	5,6325	4,7200	5,3850
h=60	c=15	6,9265	6,1110	5,0850	5,9850
h=60	c=20	7,3764	6,5860	5,1350	6,3250

4.3 táblázat. Hibabecslés az egyes módszerekkel (átlagok)

A módszerek hatékonyságának sorrendje itt is egyértelmű: a legkisebb négyzetek módszerének használatával kapjuk a legnagyobb becsült hibát, utána következik a maximum likelihood módszer, majd a teljes valószínűségi módszer két változata. Itt is elmondható az, ami a csúcsterület becslésénél: a teljes valószínűségi módszer második változata azért szolgáltat nagyobb hibaértékeket, mert ennél a háttér bizonytalansága is teljes mértékben bele van kalkulálva az eredményekbe, míg az első változatnál csak részben. Ilyen értelemben a

második változat az, amelyet „illendő” összehasonlítani a két hagyományos módszerrel, de ez is minden esetben kisebb hibát szolgáltat az előbbieknél.

Az előbbihez hasonlóan a jobb áttekinthetőség kedvéért a 4.3 táblázat adatait is ábrázoltuk (4.3 ábra).



4.3 ábra. A hibabecslés eredménye az egyes módszerekkel (átlagok).

A bal oldali ábra a 30-as össz háttér-beütésszámhoz, a jobb oldali a 60-ashoz tartozik.

Az eredményeken jól megfigyelhető az is, hogy a háttér ill. a csúcsterület nagysága hogyan befolyásolja a hibaértékeket. Az eredmény nem okoz meglepetést: nagyobb háttér várható értékhez nagyobb statisztikus hiba tartozik, a csúcsterület növekedésével viszont a hiba relatíve csökken.

### 4.3 Az intervallumba esés valószínűsége

A 3.2 alfejezetben szerepel egy olyan állítás, mely szerint a teljes valószínűségi módszerrel a kiértékelés eredményeül kapott csúcsterület – valószínűség hozzárendelés alkalmas azon valószínűség meghatározására, hogy a csúcsterület valamilyen meghatározott intervallumba esik, vagy pl. a csúcsterület egy meghatározott küszöbértéket nem halad meg. Mivel (mint a 2.4 fejezet végén már utaltam rá) itt nem "valódi" valószínűségekről van szó, felmerülhet annak a gyanúja, hogy ez az állítás nem, vagy nem teljesen állja meg a helyét. A továbbiakban leírt vizsgálatban ennek jártam utána a gyakorlat oldaláról, az 1000 darab szimulált, kiértékelt spektrumrészlet segítségével.

Amennyiben a fenti állítás igaz, 0-tól egy kiválasztott küszöbértékig összegezve egy eloszlás valószínűségeit, és az azonos  $p$  összeg-valószínűséget mutató spektrumrészleteket megvizsgálva a tényleges csúcsterületük az esetek  $p$ -ed részében esik a küszöbérték alá, amennyiben elegendően nagy számú spektrumrészletet vizsgáltunk.

Ez az elgondolás ebben a formában gyakorlatilag kivitelezhetetlen, mivel a csúcsterületekhez tartozó valószínűségek akármilyen értéket felvehetnek 0 és 1 között, így az 1000 spektrumrészlet között kettőt sem lehetett volna találni, amelyeknél ugyanahhoz a küszöbértékhez ugyanaz az összeg-valószínűség tartozik. A vizsgálat elvégzéséhez azonban nem feltétlenül szükséges a küszöbérték rögzítése, elegendő, ha a valószínűséget rögzítjük. Ez egy másik előnnyel is jár: a vizsgálatban részt vevő spektrumrészletek valódi csúcsterülete sem kell megegyezzen, így a statisztikailag már elegendően nagy elemszámúnak (1000) minősülő mintával dolgozhatunk.

A vizsgálat során követett eljárás a következő volt: egyenként egymás után véve a spektrumrészleteket, és a hozzájuk tartozó eloszlást, megkerestem az előre meghatározott valószínűséghez a konkrét esetben tartozó küszöbértéket, majd összehasonlítottam a tényleges csúcsterülettel. Végeredményül azon esetek számát kaptam meg, amelyekben az aktuális csúcsterület nem haladta meg az aktuális küszöbértéket.

A teljes valószínűségi módszer diszkrét jellegéből adódóan (csak a csúcsterületek egész értékéhez rendel valószínűséget) a küszöbértékek egzakt meghatározása nem volt lehetséges: a 0 csúcsterülettől felfelé haladva összeadva a csúcsterületekhez tartozó valószínűségeket, egy bizonyos csúcsterületnél ez az összeg-valószínűség még nem érte el az előre megadott  $p$  valószínűséget, a következő valószínűséget hozzáadva viszont már meghaladta azt. Ezért nem volt egyértelmű, hogy az így meghatározott két szomszédos csúcsterület közül melyiket tekintjük küszöbértéknek. Az előbbi a végeredmény alul- míg az utóbbi felülbecslését

eredményezte volna. Végeredménynek ezért az ezen két küszöbértékkel kapott eredmények átlagát vettem, ami közelítő megoldásnak tekinthető. (Két csúcsterület között a valószínűségek lineáris, vagy egyéb interpolációval való meghatározásának nem lett volna értelme, lévén a valódi csúcsterületek is egész számok).

Az alábbi táblázatok tartalmazzák az eredményeket.

	0,05	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	0,95
5/30	4	8	14	23	32	43	54	67	83	90	95
10/30	4	9	16	25	36	47	59	71	85	96	98
15/30	2	8	17	24	38	44	52	64	72	84	92
20/30	5	7	10	15	26	39	52	65	74	83	93
5/60	4	6	14	27	35	50	65	73	90	96	100
10/60	5	12	20	28	38	46	55	66	75	85	90
15/60	3	6	14	24	30	41	48	60	72	87	91
20/60	4	5	20	29	39	46	60	69	80	86	90

4.4a táblázat. Küszöbértékek (alulbecslés)

	0,05	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	0,95
5/30	8	10	23	33	45	58	72	86	89	96	99
10/30	9	12	24	37	48	61	72	85	93	98	100
15/30	6	14	24	39	44	55	64	71	82	92	96
20/30	7	8	15	29	40	55	66	74	81	93	97
5/60	5	13	25	33	51	68	74	90	95	100	100
10/60	6	16	25	37	45	54	65	74	80	87	94
15/60	5	10	21	30	59	47	58	71	82	90	94
20/60	4	9	24	38	44	56	68	73	84	87	93

4.4b táblázat. Küszöbértékek (felülbecslés)

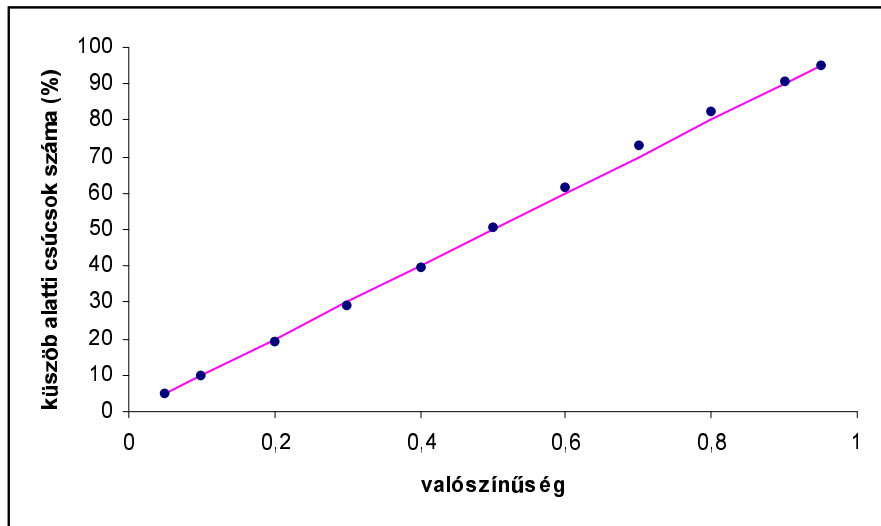


	0,05	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	0,95
5/30	6	9	18,5	28	38,5	50,5	63	76,5	86	93	97
10/30	6,5	10,5	20	31	42	54	65,5	78	89	97	99
15/30	4	11	20,5	31,5	41	49,5	58	67,5	77	88	94
20/30	6	7,5	12,5	22	33	47	59	69,5	77,5	88	95
5/60	4,5	9,5	19,5	30	43	59	69,5	81,5	92,5	98	100
10/60	5,5	14	22,5	32,5	41,5	50	60	70	77,5	86	92
15/60	4	8	17,5	27	44,5	44	53	65,5	77	88,5	92,5
20/60	4	7	22	33,5	41,5	51	64	71	82	86,5	91,5

4.4c táblázat. Küszöbértékek (átlag)

A vizsgált minta valójában csak 800 elemű volt: ki kellett hagyni belőle a 200 darab 0 csúcsterületű spektrumrészletet, amelyekre természetesen minden alkalommal teljesült, hogy a csúcsterületük nem haladta meg a küszöbértéket. A többi esetben nem okozott problémát az egyes spektrumrészleteknél a csúcsterületek különböző volta, a 0 csúcsterületnek ebben az esetben kitüntetett szerepe van. Ugyanis különböző valódi csúcsterületű spektrumrészleteknél az eloszlás is más és más lesz, így az adott valószínűséghez megállapított küszöbérték is nagyban különbözhet. A módszer viszont 0-nál kisebb csúcsterületekhez nem rendel valószínűséget, így eleve lehetetlen lett volna olyan küszöbértéket megállapítani, amelyet a 0 csúcsterület meghalad.

A 800 darab spektrumrészletet százas csoportokban vizsgáltam (bár erre, mint az eredmények is mutatják, különösebb szükség nem volt), egy csoportba véve azokat, amelyek azonos csúcsterületűek és háttér várható értékűek voltak. A táblázatok nyolc sora ezeknek a százas csoportoknak felel meg, a sor elején feltüntetve a csúcsterület/háttér várható érték adatot. A táblázatok oszlopai egy-egy adott  $p$  valószínűségnek felelnek meg. A táblázatokban szereplő számadatok azt jelentik, hogy a 100 spektrumrészlet közül hányban nem haladta meg a csúcsterület a táblázat oszlopának megfelelő valószínűséghez tartozó küszöbértéket. A három táblázat a fent leírtaknak megfelelően a felül- ill. alulbecsült értékeket, ill. ezek átlagát tartalmazza. A 4.4 ábrán pedig a végeredmény látható: pontok jelölik az adott valószínűséghez tartozó küszöbértéket meg nem haladó csúcsterületű csúcsok számát százalékban (a 800 spektrum összességére), folytonos vonal pedig ennek az elméletileg várható értékét.



4.4 ábra. A küszöb alatti csúcsok száma – elméleti és számított érték

A pontok jól követik az elméletileg várt értékeket, a kis mértékű fluktuációt valószínűleg a számadatok közelítő meghatározási módja okozza. Ezen eredmények alapján kijelenthető, hogy a teljes valószínűségi módszer végeredményéül kapott csúcsterület-eloszlások alkalmasak analitikai küszöbértékek meghatározására, ill. segítségével csúcsterület-intervallumokba esések valószínűségei meghatározhatók.

## 5. Mért spektrumok kiértékelése

### 5.1 A teljes valószínűségi módszer tesztelése mért gamma-spektrumokon

Szimulációinkban – mint az a 4. fejezetben olvasható – törekedtünk arra, hogy a spektrumrészleteket tényleges keletkezésüket minél jobban követő módon hozzuk létre; főként azok a tulajdonságaik, amelyek a kiértékelő eljárások eredményét befolyásolják, ne térjenek el a valódiaktól. Másrészt a kereskedelmi forgalomban lévő spektrumkiértékelő szoftverek az előző fejezetben leírt egyszerű görbeillesztésen kívül számos olyan kiegészítő számítást alkalmaznak, amelyek a mért gamma-spektrumok kiértékelését pontosabbá teszik.

Mindezek érdekében az alábbi két gamma-spektrum néhány csúcsának területét határoztuk meg. Az 5.1a., b., ábrán a spektrumoknak az általunk vizsgált tartománya látható. A spektrumok a budapesti Izotóp- és Felületkémiiai Intézetben, a Nukleáris Kutatások Osztályán készültek Compton-elnyomásos nagy tisztaságú germánium-detektorral. A spektrumok gyűjtéséhez Canberra S100-as sokcsatornás analizátorkártyát használtunk.

Az ábrán látható mindkét spektrum ugyanazzal a mintával végzett mérés eredménye, a különbség közöttük az, hogy a felső az alsónál jóval hosszabb ideig készült. A teljes valószínűségi módszer tesztelésére csak a rövid ideig mért spektrum alkalmas. A hosszú mérési idejű spektrumot a TVM-rel meghatározandó csúcsterületekhez referenciaérték számítására használtuk.

Mivel a két spektrum ugyanarról a mintáról készült, azonos energiájú csúcsokat tartalmaznak. Az *a.*, spektrum csúcsai a hosszú mérési idő miatt jó statisztikájúak, területük görbeillesztéssel kis statisztikus hibával meghatározható. Az *a.*, jelű spektrum csúcsterületeit a gamma-spektrometriai gyakorlatban jól bevált Hypermet-PC szoftver segítségével határoztuk meg. A Hypermet-PC programot az Izotópkutató Intézetben fejlesztették ki, és a világ számos neutronaktivációs analitikai laboratóriumában alkalmazzák [Phi76], [Faz97].

5.1a, b ábra.  $^{56}\text{Co}$  gamma-spektrumai (részletek).

Az a., (felső) ábra a hosszú mérési idejű, a b., (alsó) ábra a rövid mérési idejű spektrum.

A Hypermet a nemlineáris legkisebb négyzetek módszerének segítségével illeszt meghatározott görbét a spektrum csúcsaihoz. Az illesztésnél alkalmazott függvénygörbe viszonylag kis beütésszámok esetén Gauss-görbe, lineáris, esetleg parabolikus háttéren. Csúcskereső funkciója a csúcsokat a spektrumon végigfutó kétszeres differenciáló és simító algoritmussal találja meg; a háttér szórásának háromszorosát meghaladó beütésszámú csúcsokat nagy biztonsággal regisztrálja. Az így megtalált csúcsok magasságát és pontos helyét illeszti, a csúcs szélességét egy előre meghatározott kalibrációs függvény szolgáltatja. [Phi76], [Rév00].

A *b.*, spektrum csúcsterületeit mind a teljes valószínűségi módszerrel, mind a Hypermet szoftverrel meghatároztuk.

Hat csúcs bizonyult alkalmasnak a teljes valószínűségi módszerrel való kiértékelésre, ezeket az 5.1 ábra alján nyíl jelöli. Az ezeknél kisebb csúcsok területe nem éri el a kimutatási határt, az ezeknél nagyobbakat pedig már nem érdemes a teljes valószínűségi módszerrel vizsgálni a görbeillesztéssel kapott eredményekkel való jó egyezés és a TVM nagy időigénye miatt.

A vizsgált hat csúcs közül az utolsó (az 1037,939 keV energiájú)  $^{56}\text{Co}$  fotocsúcsa, a másik öt háttércsúcs. Ez utóbbiak olyan, zömmel környezeti tényezőktől származtak, melyek hatása időben állandónak tekinthető. Ahhoz, hogy az *a.*, spektrum csúcsainak területe a *b.*, spektrumbeli csúcsterületek referenciaértékétől szolgálhasson, a 6. csúcs esetében három, a többinél két korrekciós tényezőt kellett figyelembe venni.

A mérési idők hányadosával mind a hat esetben korrigálni kellett a csúcsterületeket. A két mérés közötti, ill. a mérések alatti radioaktív bomlásból adódó eltérést csak a 6. csúcsonál kellett figyelembe venni. Hasonlóképpen a harmadik korrekciós tényezőt, amelyet a két mérésnél kissé eltérő minta–detektor-távolság miatt kellett kiszámítani (a háttércsúcsokra ez sem vonatkozott, mivel azok nem a mintából származtak). A három korrekciós faktor értéke a következő volt:

- 1) Az *a.*, spektrum mérési ideje 233137 s volt, a *b.*, spektrumé 1000 s, a holtidő mindkét esetben elhanyagolható volt. Az *a.*, spektrum csúcsterületeit ez alapján  $4.289 \cdot 10^{-3}$ -mal kellett szorozni, hogy megkapjuk a *b.*, spektrumbeli csúcsterületek várható értékét.
- 2) A *b.*, spektrum egy héttel az *a.*, előtt készült. A mérések ideje alatti lecsengés az eddigiekhez képest olyan kis mértékben módosította volna az eredményeket, hogy elegendőnek pontosnak bizonyult egyszerűen a hosszú mérés idejének felét hozzáadni a két mérés között eltelt időhöz (7 + 1,35 nap), és erre az időtartamra

végezni el a bomlási korrekciót. A  $^{56}\text{Co}$  felezési idejét 77,3 napnak véve [TOI96] ez 1,0777-es szorzótényezőt jelent.

- 3) A minta–detektor-távolság a két esetben különböző volt. Mivel az intenzitásokat a távolságnégyzetek arányával kell osztani, a geometriai korrekciós faktor ebből 1,0152-nek adódott.

Minden csúcs területének meghatározásánál 10 csatorna szélességű tartományt vizsgáltunk. A kiértékelés eredményét az 5.1 táblázat tartalmazza. A táblázat oszlopai sorrendben a csúcsok helyét, az *a.*, spektrum csúcsterületeit, az ezekből számolt referenciaértékeket, végül pedig a Hypermet ill. a TVM által szolgáltatott csúcsterület-értékeket tartalmazzák.

	Energia (keV)	Csúcsterület ("jó" spektrum)	Csúcsterület (rövid mérési idejű spektrum)		
			referenciaérték	Hypermet	TVM
1.	47,581	5171	22,2	22	24
2.	163,379	1065	4,6	(0,83)	2
3.	186,728	1253	5,4	(10)	5
4.	662,167	8401	36	39	40
5.	692,457	3754	16,1	20	21
6.	1037,939	4135	19,4	21	20

5.1 táblázat. A csúcsterület-meghatározás eredményei

A Hypermet beépített csúcskereső algoritmus a két esetben meg sem találta a vizsgált csúcsot. Ekkor a csúcs pozíciójának ismeretében a paraméterek kézi beállításával illesztettünk csúcsot a beütésértékekre. (Egészen pontosan: csak a csúcskereső algoritmus „tévedését” korrigáltuk, az illesztés ugyanazon mechanizmus szerint történt, mint a többi csúcs esetén.) Ez két esetben fordult elő, ezeket a táblázatban zárójelbe tett értékkel jeleztük. Azokban az esetekben, amikor a Hypermet „megtalálta” a csúcsot, mindkét módszer hibahatáron belül egyező eredményt adott a referenciaértékkel. A két fennmaradó csúcsonál már jelentősebb az eltérés. Az igazán szignifikáns különbség a két módszer szolgáltatott eredményekben azonban a csúcsterületértékek becsült hibájában van. Ezt szemlélteti az 5.2 ábra. Ezen a pontozott vonalak a teljes valószínűségi módszerrel számolt valószínűségeloszlásokat jelölik (a pontokat összekötő görbeszakaszok nem bírnak jelentéssel, csak a jobb áttekinthetőséget

szolgálják). Folytonos vonallal ábrázoltuk a Hypermet által szolgáltatott eredményeket. A görbék olyan Gauss-görbének felelnek meg, amelyek maximuma a becsült csúcsterületértéknél van, szélességét pedig a csúcsterület becsült hibájának megadására szokásosan használt  $\sigma$  paraméter határozza meg. A görbék alatti terület mindkét esetben 1-re normált (az első esetben diszkrét, a másodikban folytonos függvényről van szó).

5.2a-f ábra. A legkisebb négyzetek módszerével, ill. a teljes valószínűségi módszerrel számolt valószínűségeloszlások a hat vizsgált csúcsra vonatkozóan

A Gauss-görbék mind a hat esetben szélesebbek, mint a TVM eredményfüggvényei, amely a görbeillesztéssel számolt csúcsterületek nagyobb statisztikus hibájára utal. Ezenkívül a Gauss-görbék két esetben átnyúlnak a negatív csúcsterületek tartományába, ami fizikailag értelmezhetetlen. A TVM eredményei a számítási módból adódóan eleve nem adnak 0-nál kisebb csúcsterületekre pozitív valószínűséget. A harmadik lényeges különbség, hogy a TVM eloszlásgörbéi egyértelműen aszimmetrikusak, ellentétben a Gauss-görbékkel. Ez is mutatja, hogy kis beütésszámok esetén a szokásos  $\pm\sigma$  hibamegadási mód pontatlan, hiszen a csúcsterület szórása pozitív irányban egészen más lehet, mint negatív irányban.

## **5.2 A teljes valószínűségi módszer alkalmazása radioaktív szennyeződés eredetének meghatározására**

Ebben a fejezetben a teljes valószínűségi módszer egy valós alkalmazását mutatjuk be, azaz célunk az itt leírt vizsgálattal már nem a módszer tesztelése, hanem egy tényleges probléma megoldása volt.

A Paksi Atomerőmű környezetében végzett rutinmérések alkalmával  $^{137}\text{Cs}$  szennyeződést fedeztek fel egyes növényi mintákban. Egynyári növények esetében a szennyeződés mértéke kimutatási határ alatt maradt, hosszabb életidejű növényi részeknél (fakéregnél, mohánál) viszont jól detektálható volt. A feladat annak eldöntése volt, hogy a szennyeződés paksi eredetű-e, vagy az 1986-os csernobili atomerőmű-baleset következtében került a növényekre. Ennek érdekében a  $^{134}\text{Cs}$  és a  $^{137}\text{Cs}$  izotópok aktivitás-arányát vizsgáltuk. Csernobili eredet esetén a szennyeződés idején a Magyarországon jellemző arány 0,48 volt [Che96], a két nuklid felezési idejének ismeretében (ez  $9,51 \cdot 10^8$  s a  $^{137}\text{Cs}$ -re, és  $6,51 \cdot 10^7$  s a  $^{134}\text{Cs}$ -re) kiszámítható volt az 1999-ben, a mintavétel idején várt arány. Ezen adatok szerint a  $^{134}\text{Cs}$  aktivitása ekkor 0,0127-szerese, míg a  $^{137}\text{Cs}$ -é 0,742-szorosa kellett legyen a kibocsátáskori értéknek. A csernobili eredet esetén várt  $^{134}\text{Cs}/^{137}\text{Cs}$  aktivitásarány ezek alapján  $8,22 \cdot 10^{-3}$ -ra adódott. Ezt az adatot látva nem meglepő, hogy a szokásos elven működő spektrumkiértékelő szoftver a minták  $^{134}\text{Cs}$  tartalmát nem is regisztrálta\*.

---

\* A méréseket és a kiértékelést Bodnár Róbert (Paksi Atomerőmű), ill. Somlai János (VE Radiokémia Tanszék) végezték.



Paksi eredet esetében a várt arány 0,577 volt, ezt az értéket az éves paksi kibocsátási adatokból [PAK86-99] kaptuk 1986 és 1999 között bomlásra korrigálva, majd összegezve.

A tényleges aktivitásarány, és így a szennyeződés eredetének meghatározásához három mintáról készültek mérések. Ezek az erőműtől 1,5-2,5 km-re levő, különböző ellenőrző pontokon vett, 20 évnél idősebb fák törzséről származó kéregminták voltak. A mintákat 105°C-os hőmérsékleten szárították, őrölték, majd homogenizálták. A por alakú mintákat ezután 500 cm<sup>3</sup> térfogatú, Eurostandard C2 0540G típusú Marinelli mintatartóba töltötték.

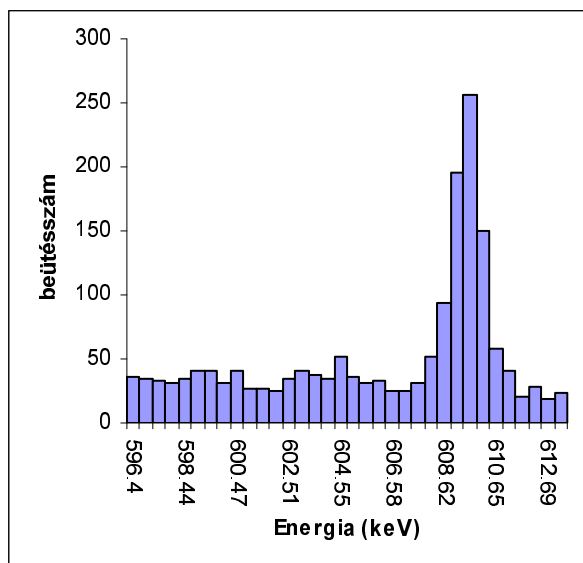
A minták gamma-spektrumát Canberra típusú nagy tisztaságú germánium detektorral, és Canberra IB sokcsatornás analizátorral vették fel. Adatgyűjtésre, energiakalibrációra és csúcsazonosításra a Canberra Genie 2K szoftvert használták. A kalibrációs forrás Amersham QCY.48 típusú zárt forrás volt.

Mindhárom spektrumban két csúcs képezte vizsgálat tárgyát: a 604,74 keV energiájú <sup>134</sup>Cs csúcs, ill. a 661,64 keV-es <sup>137</sup>Cs csúcs. A detektor határfoka az előbbi energián  $1,289 \cdot 10^{-2}$  volt, az utóbbin  $1,209 \cdot 10^{-2}$ .

A 661,64 keV-es csúcs területe jól meghatározható volt mindhárom esetben, a 604,74 keV-es csúcsot viszont a kiértékelésre használt Genie PC szoftver csúcskereső algoritmusában egyik esetben sem találta meg, és a területét a paraméterek kézi beállítása esetén sem tudta elfogadható megbízhatósággal meghatározni. Ez volt az ok, amiért a <sup>134</sup>Cs-csúcs területének meghatározásához a teljes valószínűségi módszert vettük igénybe. Az 5.3 ábrán az egyik minta spektrumának a 604,74 keV-es csúcsot tartalmazó része látható (a három minta spektruma annyira hasonló volt egymáshoz, hogy a továbbiakban közülük csak az egyik kiértékelését mutatjuk be ábrákon keresztül, a másik kettőre csak a végeredményeket közöljük). A <sup>134</sup>Cs-csúcs mellett levő nagyobb csúcs a <sup>214</sup>Bi izotóp 609,31 keV-es csúcsa, amely a mintát körülvevő szerkezeti anyagokból származik. A bizmut-csúcs nem fed át a <sup>134</sup>Cs csúcsával, így a kiértékelést nem befolyásolja.

Számításainkhoz szükségünk volt egy etalon mérésére is, egyrészt a csúcs alakját leíró valószínűségek meghatározásához, másrészt ahhoz, hogy beütésszámok helyett aktivitások valószínűségeloszlását tudjuk meghatározni. Az etalon 0,631 Bq/kg aktivitású <sup>134</sup>Cs-ot, és 137 Bq/kg aktivitású <sup>137</sup>Cs-ot tartalmazott. Az etalon spektrumának felvétele azonos mérési

körülmények között történt az ismeretlen aktivitású mintakéval, beleértve ebbe a minta-geometriát és az elektronika beállításait is, mint ahogy a kiértékelés módja is megegyezett.



5.3 ábra.  $^{134}\text{Cs}$ -tartalmú minta gamma-spektruma (részlet).

A  $^{134}\text{Cs}$  csúcs 604,74 keV energiánál található, a 609,31 keV-nél látható nagyobb csúcs a  $^{214}\text{Bi}$  csúcsa.

A teljes valószínűségi módszer alkalmazása egyik esetben sem ütközött különösebb nehézségbe; a 2.4 fejezetben leírt eljárást követtük. A vizsgált spektrumtartomány minden esetben 10 csatornából állt. Az egyetlen egyszerűsítést a viszonylag nagy háttérértékek miatt alkalmaztuk: két beütést minden csatornában automatikusan a háttérhez rendeltünk, a 4.1.3 alfejezetben részletesen leírt eljárás szerint. Ez az egyszerűsítés elhanyagolható mértékben módosította csak az eredményül kapott valószínűségeloszlást, a számításba veendő lehetőségek számát, és így a számolási időt viszont jelentősen csökkentette.

Az 5.3 ábrán bemutatott spektrumra ill. az etalonra kapott valószínűségeloszlásokat az 5.4a, b., ábra tartalmazza. A három mintánál az eloszlások maximuma 16, 21, ill. 38 volt és egyik esetben sem elhanyagolható mértékű annak valószínűsége, hogy a  $^{134}\text{Cs}$  a mintában nem is volt jelen. Az etalon eloszlásának maximuma 109 beütésnél van, és itt a 0 csúcsterület valószínűsége a várakozásnak megfelelően elhanyagolható.

Az eddigiekkel ellentétben a csúcsterületek valószínűségeloszlásainak megadása még nem jelenti a feladat megoldását. A  $^{134}\text{Cs}$  és a  $^{137}\text{Cs}$  csúcsok területének aránya nem egyezik meg a  $^{134}\text{Cs}/^{137}\text{Cs}$  aktivitásarányával, mivel különböző energiájú csúcsok esetében a detektor hatásfoka is különböző. Ahhoz, hogy aktivitásarányt, ill. a teljes valószínűségi módszer alapkonceptiójának megfelelően az aktivitásarány valószínűségeloszlását tudjuk számítani,

először az egyes izotópok aktivitásainak eloszlását kell meghatározni. A három mintában a  $^{134}\text{Cs}$  aktivitásának valószínűségeloszlását az etalon ugyanezen csúcsával való összehasonlítás alapján számítottuk ki, a következő módon:

5.4a, b ábra. Az ismeretlen minta (felső ábra) és az etalon (alsó ábra) teljes valószínűségi módszerrel való kiértékelésének eredménye.

Az ismeretlen aktivitású minta és az etalon csúcsterület-eloszlásából indultunk ki. Számpárokat képeztünk, amelyek egy-egy csúcsterület-arányt jelentettek, pl. az 1:2

csúcsterületarány valószínűségének kiszámításához az [1,2], [2,4], [3,6], ... számpárokat vettük alapul. A számpár első tagjához, mint csúcsterülethez megkerestük az ismeretlen aktivitású minta eloszlásában tartozó valószínűséget, a számpár második tagjához pedig az etalon eloszlásából vettük az ott hozzá tartozó valószínűséget. A számpárhoz, mint csúcsterületarányhoz ezen két valószínűség szorzatát rendeltük. Végül az azonos csúcsterületarányt reprezentáló számpárokhöz rendelt valószínűségeket összeadtuk, és ezt az összeg-valószínűséget rendeltük az adott csúcsterület-arányhoz. Ez az arány már aktivitás-aránynak is tekinthető, hiszen azonos körülmények között felvett, azonos energiájú csúcsokat hasonlítottunk össze. Az etalon  $^{134}\text{Cs}$  aktivitásának ismeretében pedig ez az aktivitásarány-eloszlás, abszolút aktivitás-eloszlássá számolható át.

Mivel a csúcsterület-eloszlásoknál csak egész beütésszámértékekhez tartoztak valószínűségértékek, ezért az arányok pontosabb kiszámításához lineáris interpolációval határoztunk meg tört-beütésszámokhoz tartozó valószínűségeket is. Amennyiben például célunk ahhoz tartozó valószínűség kiszámítása, hogy az etalon éppen 2,5-ször annyi  $^{134}\text{Cs}$ -ot tartalmaz, mint az ismeretlen minta, a [1, 2,5], [2, 5], ..., [19, 47,5], [20, 50]... csúcsterület-arányokhoz tartozó valószínűségeket kell összeadnunk.

Ezzel a számítási móddal élesebb maximummal rendelkező valószínűségeloszlásokat kaphatunk, mintha egyszerűen a becsült csúcsterületek arányát vennénk, és az arány hibáját a hibaterjedés szabályának megfelelően számítanánk az eredeti csúcsterületértékek hibájából.

Mivel a  $^{137}\text{Cs}$  csúcsok területét a szokásos görbeillesztési eljárással, gyári szoftverrel határoztuk meg, az aktivitást is az előbb említett, szokásos módon számoltuk az etalon segítségével. Mivel itt jó statisztikájú csúcsokról volt szó, a teljes valószínűségi módszerrel, és az előbbieken leírt aktivitásmeghatározó számítással sem kaptunk volna jelentősen jobb eredményeket.

Az előzőekben leírt számítások elvégzése után már rendelkezésünkre állt a három mintában a  $^{134}\text{Cs}$  aktivitása (aktivitás-valószínűségeloszlás formájában), ill. a  $^{137}\text{Cs}$  aktivitása (a szokásos "érték  $\pm$  hiba" formában). Ezek után a  $^{134}\text{Cs}/^{137}\text{Cs}$  aktivitásarány az egyes mintákban, ill. az ehhez tartozó valószínűségeloszlás meghatározása már egyszerűen, a  $^{134}\text{Cs}$  aktivitás-eloszlás minden egyes aktivitásértékének a  $^{137}\text{Cs}$  aktivitásával való elosztásával történt. Ennél a számításnál nem vettük figyelembe a  $^{137}\text{Cs}$  aktivitásának becsült hibáját, mivel ez

elhanyagolható volt a  $^{134}\text{Cs}$  aktivitásának hibája mellett. Az aktivitásarányok eloszlását mutatja be az 5.5 ábra.

5.5 ábra. A három minta  $^{134}\text{Cs}/^{137}\text{Cs}$  aktivitásarány-valószínűségeloszlása.

A nyíl a csernobili eredet esetében várt aktivitásarányt jelzi.

A három mintához tartozó eloszlásokat egy grafikonon ábráztuk, nyíl jelzi a csernobili eredet esetén várt aktivitás-arányt. Paksi eredet esetén ez az arány jóval nagyobb, 0,577 lett volna, így a kiértékelés egyértelműen igazolta a szennyeződés csernobili eredetét.

## Összefoglalás

A nukleáris spektroszkópiai eljárások eredményeit jelentős mértékben befolyásolhatja az alkalmazott spektrumkiértékelő algoritmus, ill. ennek részeként a csúcsterület-meghatározás módszere.

A dolgozat első részében áttekintést adtunk a gyakorlatban előforduló csúcsterület-meghatározó módszerekről. A leggyakrabban használt ezek közül a súlyozott legkisebb négyzetek módszere. Szó esett ezen kívül a maximum likelihood módszerről, és a kis beütésszámú spektrumtartományok kiértékelésére a közelmúltban kifejlesztett teljes valószínűségi módszerről. A dolgozat tárgyát elsősorban ez utóbbi módszer vizsgálata képezte.

Elsőként a spektroszkópiai alkalmazások néhány alapvető fogalmát: a kimutatási határt, és más analitikai határértékeket vettünk vizsgálat alá. Ezzel kapcsolatos számításainkban a L. Currie által bevezetett definíciókat vettük alapul. Currie a kritikus szintre és a kimutatási határra adott definíciójában a csúcsterület valószínűségeloszlását Gauss-eloszlással közelítette. Elsőként arra végeztünk számításokat, hogy miként befolyásolja az analitikai küszöbértékeket, ha ettől a közelítéstől eltekintünk. Eredményül azt kaptuk, hogy a kimutatási határt egészen csekély mértékben csökkenti csak, ha nem alkalmazunk közelítést.

Második lépésben a teljes valószínűségi módszer egy ilyen irányú alkalmazását dolgoztuk ki. Azonos mérési körülmények, és a fenti definíciók alapkoncepciójának változatlanul hagyása mellett pusztán a csúcsterület-meghatározásra a teljes valószínűségi módszer használatától a kimutatási határ jelentős csökkenését vártuk. Szimulációs számításaink ezt a feltételezést egyértelműen alátámasztották.

A továbbiakban a teljes valószínűségi módszernek a súlyozott legkisebb négyzetek módszerével és a maximum likelihood módszerrel való részletes összehasonlítására került sor. Az összehasonlítást szimulált spektrumrészletek kiértékelésénél mutatott hatékonyságuk alapján végeztük. Mivel a számítógépes szimuláció lehetővé tette a tényleges csúcsterület- és háttérértékek pontos ismeretét és tetszőleges értékre való beállítását, az egyes módszerek által szolgáltatott eredmények pontossága jól nyomon követhető volt. Vizsgáltuk a becsült csúcsterületek átlagos eltérését a tényleges értéktől, a becslésnél esetlegesen fellépő szisztematikus hibákat, és az egyes módszerek által a csúcsterületek statisztikus hibájára adott becsléseket. Az eredmények egyértelműen igazolták a teljes valószínűségi módszer

létezését, és legjobb voltát az egészen kis (20 körüli, vagy kisebb) beütésszámok tartományában.

Végül két gyakorlati alkalmazáson keresztül igazoltuk, hogy a teljes valószínűségi módszer a valós spektroszkópiai gyakorlatban is megállja a helyét. Az első alkalmazás  $^{56}\text{Co}$  izotóp gamma-spektrumának kiértékelése volt, melyet a teljes valószínűségi módszer mellett a Hypermet márkanévű gyári spektrumkiértékelő szoftverrel is elvégeztünk. Az eredmények itt is a teljes valószínűségi módszer hatékonyabb voltát igazolták a rossz statisztikájú csúcsok kiértékelésében.

Végül a másik gyakorlati alkalmazás célja már nem a módszer tesztelése, vagy más eljárásokkal való összehasonlítása volt, hanem egy valós spektroszkópiai probléma megoldása, amely a szokásos kiértékelő rutinnal nem bizonyult megoldhatónak. A teljes valószínűségi módszerrel a feladat megoldása nem ütközött akadályba.

A fenti vizsgálatok eredménye egyértelműen igazolta a teljes valószínűségi módszer alkalmazhatóságát, és kijelölte helyét a nukleáris spektroszkópiai gyakorlatban. A szerző meggyőződése, hogy a módszer, esetleg csekély, számítástechnikai jellegű tökéletesítés után részévé válhat a szokásos spektrumkiértékelő algoritmusoknak.

## IRODALOM

- [Che96] *One Decade after Chernobyl: Environmental Impact and Prospects for the Future* IAEA Vienna, Austria (1996)
- [Col74] A. Colenbrander, T.J. Kennett, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. **116** (1974) 237
- [Cur68] L. Currie, Anal. Chem. **40**(3) March (1968) 586-593
- [Deb88] K. Debertin, R. G. Helmer: *Gamma- and X-ray spectrometry with semiconductor detectors*, Elsevier Science B. V. (1988)
- [Fel98] G. J. Feldman, R. D. Cousins, Phys. Rev. D **57** 7 (1998) 3873-3889
- [Faz97] B. Fazekas, J. Östör, Z. Kis, G. L. Molnár, A. Simonits: *The new features of Hypermet-PC*, in. Proc. 9<sup>th</sup> International Symposium on Capture Gamma-Ray Spectroscopy and Related Topics, Budapest, Hungary, October 8-12, (Eds. G. Molnár, T. Belgya, Zs. Révay, Springer Verlag Budapest, Berlin, Heidelberg) (1997) 774-778.
- [Fis21] R. A. Fisher, Phil. Trans. A, **222** (1921) 309-368
- [Fis30] R. A. Fisher, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, **26** (1930) 528-535
- [Fis32] R. A. Fisher, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, **28** (1932) 257-261
- [Gil95] G. Gilmore, J. Hemingway: *Practical gamma-ray spectrometry* (1995), John Wiley & Sons (1995)
- [Han99] M. D. Hannam, W. J. Thompson, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A **431** (1999) 239-251
- [Ján68] Jánossy Lajos: *Mérési eredmények kiértékelésének elmélete és gyakorlata*, Akadémiai Kiadó Budapest (1968)
- [Kno89] G. F. Knoll: *Radiation detection and measurement*, John Wiley & Sons (1989)
- [Leo87] W. R. Leo: *Techniques for nuclear and particle physics experiments*, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg (1987)
- [Lyo86] L. Lyons: *Statistics for nuclear and particle physicists*, Cambridge University Press (1986)
- [Lux91] J. Lux, L. Koblinger: *Monte Carlo Particle Transportation Methods: Neutron and Photon Calculations*, CRC Press, Boston (1991)
- [Mér94] L. Méray, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A **353** (1994) 272-275
- [Mér96] L. Méray, Zs. Révay, J. Trace and Microprobe Techniques **14**(1) (1996) 173-181
- [Mér01a] L. Méray, O. Demény, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A **460** (2001) 472-474
- [Mér01b] L. Méray, O. Demény, Appl. Spec. **55** 8 (2001) 1102-1108
- [Ney37] Neyman, Philos. Trans. R. Soc., London, A **236** (1937) 333
- [Ore82] J. Orear: *Notes on Statistics for Physicists* (Revised) National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, Upton, New York 11973 (1982)
- [Pak86-99] Annual Review of the Hungarian Environmental Monitoring System around the Nuclear Power Plant Paks 1986-1999, OKK-OSSKI Budapest (1986-1999)
- [Phi76] G. W. Phillips, K. W. Marlow, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. **137** (1976) 525



- [Rév97] Zs. Révay, *Mikrochim. Acta* **126** (1997) 77-81
- [Rév00] Révay Zs.: Doktori (PhD) Értekezés, Veszprémi Egyetem (2000)
- [Sre65] J. A. Sreigyer: *Monte-Carlo módszerek*, Műszaki Kiadó, Budapest (1965)
- [TOI96] R. B. Firestone, V. S. Shirley Eds.: *Table of Isotopes*, Wiley, New York (1996)
- [Wei98] K. Weise, *Kerntechnik* **63** 4 (1998) 214-224

## **Köszönetnyilvánítás**

Mindenekelőtt köszönöm a segítségét mindkét témavezetőmnek.

Fájdalommal tölt el, hogy Méray László a doktori munka befejezésében már nem vehetett részt, és a dolgozatot nem olvashatja.

Köszönöm Révay Zsoltnak, hogy a téma vezetésének folytatását gondolkodás nélkül elvállalta, és a munka befejezését maximális odaadással segítette.

Köszönöm Molnár Gábornak, az IKI Nukleáris Kutatások Osztálya vezetőjének a gyors és hatékony intézkedését a rendkívüli helyzetben, mellyel elősegítette a munka zökkenőmentes folytatását.

Köszönöm tanszékünk vezetőjének, Szalai Istvánnak, hogy a számítások elvégzéséhez a tárgyi és időbeli feltételeket biztosította.

Köszönöm továbbá a spektrumokat és a velük kapcsolatos segítséget Somlai Jánosnak (VE Radiokémia Tanszék), valamint a matematikai konzultációt Koltay Lászlónak (VE Matematika Tanszék).