Nyomdetektor kalibrációja

Kocsy Gábor

2008. július 16.

A kalibráció során méréssorozatot végzünk, amelyben különböző expozícióknak teszünk ki nyomdetektorokat, és meghatározzuk a nyomdetektorokon kialakuló nyomsűrűséget, majd ebből levonjuk az expozíciónak ki nem tett nyomdetektorokon megfigyelhető nyomsűrűséget (háttér). A kapott nyomsűrűség-expozíció értékpárokra az origón átmenő egyenest illesztünk a legkisebb négyzetek módszerével.

Álljon tehát a méréssorozat n elemből, és jelölje x_i a nyomsűrűség értékeket, y_i pedig a hozzájuk tartozó expozíció értékeket ($i = 1, \ldots, n$). Legyen $\mathbf{v}_i := (x_i, y_i)$, és legyen $V_i := \mathrm{cov}(\mathbf{v}_i)$ a $\mathbf{v}_i$ kovariancia-mátrixa ($i = 1, \ldots, n$). Ekkor a

$$Q(\hat{\mathbf{v}}_1, \ldots, \hat{\mathbf{v}}_n, a) = \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{v}_i - \hat{\mathbf{v}}_i)^T \cdot V_i^{-1} \cdot (\mathbf{v}_i - \hat{\mathbf{v}}_i)$$

függvénynek keressük a minimumát az $y_i = a \cdot x_i$ feltétel mellett ($a \in \mathbb{R},\ i = 1, \ldots, n$). Esetünkben feltehetjük, hogy x_i és y_i kovarianciája nulla, hiszen x_i eltérése a korrigált $\hat{x}_i$ értéktől (vagyis x_i hibája) nem függ össze y_i-nek a korrigált $\hat{y}_i$-től való eltérésével (azaz y_i hibájával). Így

$$V_i = \begin{pmatrix} \sigma_{x_i}^2 & 0 \\ 0 & \sigma_{y_i}^2 \end{pmatrix},$$

amelynek inverze

$$V_i^{-1} = \begin{pmatrix} 1/\sigma_{x_i}^2 & 0 \\ 0 & 1/\sigma_{y_i}^2 \end{pmatrix}.$$

Következésképpen a

$$Q(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n, a) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_{x_i}^2} \cdot (x_i - \hat{x}_i)^2 + \frac{1}{\sigma_{y_i}^2} \cdot (y_i - a \cdot \hat{x}_i)^2$$

függvénynek keressük a minimumát. Ez $n+1$ darab egyenletet szolgáltat:

$$0 = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial Q}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_{y_i}^2} \cdot \hat{x}_i \cdot (y_i - a \cdot \hat{x}_i) \tag{1}$$

és $i \in \{1, ..., n\}$ esetén

$$0 = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial Q}{\partial \hat{x}_i} = \frac{1}{\sigma_{x_i}^2} \cdot (x_i - \hat{x}_i) + \frac{a}{\sigma_{y_i}^2} \cdot (y_i - a \cdot \hat{x}_i).$$

Ez utóbbiból következik, hogy

$$(\sigma_{y_i}^2 + a^2 \cdot \sigma_{x_i}^2) \cdot \hat{x}_i = x_i \cdot \sigma_{y_i}^2 + a \cdot y_i \cdot \sigma_{x_i}^2,$$

azaz

$$\hat{x}_i = \frac{x_i \cdot \sigma_{y_i}^2 + a \cdot y_i \cdot \sigma_{x_i}^2}{\sigma_{y_i}^2 + a^2 \cdot \sigma_{x_i}^2}. \tag{2}$$

Mielőtt ezt behelyettesítenénk az (1) egyenletbe, vegyük észre, hogy

$$\begin{aligned} y_i - a \cdot \hat{x}_i &= \frac{y_i \cdot \sigma_{y_i}^2 + y_i \cdot a^2 \cdot \sigma_{x_i}^2 - a \cdot x_i \cdot \sigma_{y_i}^2 - a^2 \cdot y_i \cdot \sigma_{x_i}^2}{\sigma_{y_i}^2 + a^2 \cdot \sigma_{x_i}^2} = \\ &= \frac{(y_i - a \cdot x_i) \cdot \sigma_{y_i}^2}{\sigma_{y_i}^2 + a^2 \cdot \sigma_{x_i}^2}. \end{aligned}$$

Ezt és (2)-t behelyettesítve az (1) egyenletbe, azt kapjuk, hogy

$$0 = \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i \cdot \sigma_{y_i}^2 + a \cdot y_i \cdot \sigma_{x_i}^2) \cdot (y_i - a \cdot x_i)}{(\sigma_{y_i}^2 + a^2 \cdot \sigma_{x_i}^2)^2}, \tag{3}$$

amit Newton-féle iterációval oldhatunk meg.

(Abban az esetben azonban, ha x_i és y_i szórása nem függ az x_i és y_i értékektől, azaz $\sigma_{x_i} = \sigma_x$ és $\sigma_{y_i} = \sigma_y$ minden $i = 1, \ldots, n$ esetén, akkor a (3) egyenlet a

$$\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i \cdot \sigma_y^2 - a \cdot x_i^2 \cdot \sigma_y^2 + a \cdot y_i^2 \cdot \sigma_x^2 - a^2 \cdot x_i \cdot y_i \cdot \sigma_x^2 = 0,$$

alakra hozható, aminek a megoldását az

$$\alpha := -\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i \cdot \sigma_x^2,$$

$$\beta := \sum_{i=1}^{n} y_i^2 \cdot \sigma_x^2 - x_i^2 \cdot \sigma_y^2$$

és

$$\gamma := \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i \cdot \sigma_y^2$$

mennyiségek bevezetésével az

$$a = \frac{-\beta \pm \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}}{2\alpha}$$

alakban írhatjuk fel.)

Hibaszámítás és kimutatási határ számítása nyomdetektorral történő radonmérésekhez

A kalibrációs egyenes meredekségének a hibáját nagyon bonyolult kiszámítani, így ezt egyelőre tekintsük ismeretlennek.

Jelölje R a radonkoncentrációt, x a mért nyomsűrűséget, a a kalibrációs egyenes meredekségét, b a háttér nyomsűrűségét, t pedig a mérési időt. Ekkor a radonkoncentrációt az

$$R = \frac{a \cdot (x - b)}{t} \tag{4}$$

képlet adja meg. Ennek hibája, ha az időmérés hibáját elhanyagoljuk:

$$\sigma_R^2 = \left(\frac{x - b}{t}\right)^2 \cdot \sigma_a^2 + \left(\frac{a}{t}\right)^2 \cdot (\sigma_x^2 + \sigma_b^2).$$

A mért nyomsűrűség hibája arányos a nyomsűrűséggel:

$$\sigma_x = c \cdot x,$$

így

$$\sigma_R^2 = \left(\frac{x - b}{t}\right)^2 \cdot \sigma_a^2 + \left(\frac{a}{t}\right)^2 \cdot (c^2 \cdot x^2 + \sigma_b^2). \tag{5}$$

A (4) egyenletből kifejezve x-et és (5)-be helyettesítve azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \sigma_R^2 &= \left(\frac{R}{a}\right)^2 \cdot \sigma_a^2 + \left(\frac{a}{t}\right)^2 \cdot \left(c^2 \cdot \left(b + \frac{t \cdot R}{a}\right)^2 + \sigma_b^2\right) = \\ &= \left(\frac{\sigma_a^2}{a^2} + c^2\right) \cdot R^2 + \frac{2 \cdot a \cdot b \cdot c^2}{t} \cdot R + 2 \cdot \left(\frac{a}{t}\right)^2 \cdot \sigma_b^2. \end{aligned} \tag{6}$$

A kimutatási határ, L_D, a következőképpen számolható:[1]

$$L_D = L_C + k_\beta \cdot \sigma_D = k_\alpha \cdot \sigma_0 + k_\beta \cdot \sigma_D, \tag{7}$$

ahol σ_0 a mérés bizonytalansága, ha a mérés várható értéke 0, és σ_D a mérés bizonytalansága, ha a mérés várható értéke L_D. A (6) egyenlet alapján

$$\sigma_0^2 = 2 \cdot \left(\frac{a}{t}\right)^2 \cdot \sigma_b^2$$

és

$$\sigma_D^2 = \left(\frac{\sigma_a^2}{a^2} + c^2\right) \cdot L_D^2 + \frac{2 \cdot a \cdot b \cdot c^2}{t} \cdot L_D + 2 \cdot \left(\frac{a}{t}\right)^2 \cdot \sigma_b^2.$$

A (7) egyenletet átrendezve és négyzetre emelve, a $k := k_\alpha = k_\beta$ választással azt kapjuk, hogy

$$\left(\frac{L_D}{k}\right)^2 - 2 \cdot \sigma_0 \cdot \frac{L_D}{k} = \sigma_D^2 - \sigma_0^2 = \left(\frac{\sigma_a^2}{a^2} + c^2\right) \cdot L_D^2 + \frac{2 \cdot a \cdot b \cdot c^2}{t} \cdot L_D.$$

Átrendezve az egyenletet azt kapjuk, hogy

$$\left(\frac{\sigma_a^2}{a^2} + c^2 - \frac{1}{k^2}\right) \cdot L_D^2 + 2 \cdot \left(\frac{a \cdot b \cdot c^2}{t} + \frac{\sigma_0}{k}\right) \cdot L_D = 0.$$

Az $L_D = 0$ gyök nyilvánvalóan hamis gyöke az egyenletnek, hiszen ekkor $\sigma_D = \sigma_0$, így a (7) egyenlet szerint $L_D = 2 \cdot k \cdot \sigma_0 \neq 0$. Az egyenlet megoldása tehát

$$L_D = 2 \cdot \frac{\frac{a \cdot b \cdot c^2}{t} + \frac{\sigma_0}{k}}{\frac{1}{k^2} - c^2 - \frac{\sigma_a^2}{a^2}} = \frac{2 \cdot k}{t} \cdot \frac{a \cdot b \cdot k \cdot c^2 + \sigma_0 \cdot t}{1 - c^2 \cdot k^2 - k^2 \cdot \frac{\sigma_a^2}{a^2}}.$$

[1] Lloyd A. Currie, Limits for Qualitative Detection and Quantitative Determination, Analytical Chemistry Vol. 40, No. 3, March, 1968, pp. 586-593.