Radex

Christian Walther Andersen

9. april 2021

* * *

Setup

Kildekoden kan downloades fra GitHub: `https://github.com/cwand/radex`. *Radex* er skrevet i Python og kan bruges uden installation. Der er dog et par variable, der skal angives i kildekoden, inden programmet er helt klar til at køre.

Installation

Hvis man ønsker at installere *Radex*, fx hvis programmet skal bruges på en arbejdsstation, der ikke har Python installeret, kan dette gøres ved brug af Python-modulet `pyinstaller`:

```
>>> pyinstaller main.spec
```

Når installationen er fuldført findes en ny mappe med navnet `dist`, der indeholder alt, der er nødvendigt for at køre programmet. Denne mappe kan så kopieres over på den tiltænkte arbejdsstation, og programmet kan køres derfra.

Opsætning

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Matematisk baggrund

Til beregning af den målte aktivitet er der to usikkerheder, som *Radex* holder styr på: usikkerheden på følsomheden samt usikkerheden forbundet med tællestatistikken.
Usikkerheden på følsomheden kommer fra, at vi har et antal målinger foretaget på kilder, der har en kendt aktivitet. Lad den baggrundskorrigerede tællerate på hver måling være R_i og aktiviteten på kilden være A_i (antaget uden usikkerhed), hvor $i = 1, \ldots, N$. Vores estimater for følsomheden er så $\kappa_i = R_i/A_i$, og middelværdien er

$$\overline{\kappa} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\kappa_i. \tag{1}$$

Vi beregner standardfejlen på $\overline{\kappa}$ ud fra en antagelse om, at κ_i er normalfordelt. Hvis den antagelse holder fås usikkerheden på $\overline{\kappa}$ til

$$\sigma_{\overline{\kappa}} = \frac{s_\kappa}{\sqrt{N}}, \tag{2}$$

hvor s_κ er et estimat for standardafvigelsen

$$s_\kappa = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} (\kappa_i - \overline{\kappa})^2}{N-1}}. \tag{3}$$

Estimaterne κ_i vil ikke være eksakt normalfordelte, og en direkte simulering viser, at standardfejlen typisk er undervurderet for små tælletal og overvurderet for store tælletal.
Den tællestatistiske baggrund for programmet er taget fra ref. [1], og er kort summeret her.
Den primære data vi arbejder med er tælletal (counts), som med kendt måletid og følsomhed nemt kan omsættes til en aktivitet. Vi ignorerer usikkerheden på begge disse to omsætningsparametre. Der er tre tælletal, vi skal holde styr på: Baggrunden B, signalet S og det totale tælletal $G = B+S$. Vi kan måle B og G, men $S = G - B$ kan ikke måles direkte.
Vi antager, at tælletallene er Poisson-fordelte, altså at B kan tænkes som et tilfældigt tal trukket fra en Poissonfordeling med middelværdi og varians μ_B, og ligeledes for G og S. Dermed vil den estimerede standardafvigelse på baggrunden være $\sigma_B = \sqrt{B}$, mens den estimerede standardafvigelse på signalet er $\sigma_S = \sqrt{B+G}$.
Spørgsmålet, som ref. [1] forsøger at besvare er, hvornår vi kan sige at et givet signal S er lig med en detektion og hvor stor usikkerhed vi skal give til målingen. I den forbindelse fastsætter vi to grænser: Den første er det kritiske niveau L_C. Hvis $S > L_C$ vil vi sige, at vi har observeret et signal, der ikke blot er et udsving i baggrunden. Den anden grænse er detektionsgrænsen L_D. Den angiver, hvor stort et tælletal en kilde skal have, før vi *a priori* kan forvente at observere et signal, der er større end L_C.
Med til disse grænser hører et valg om, hvor stor tolerance vi vil tillade for at lave fejl af type I (α, falsk positiv) og type II (β, falsk negativ). *Radex* sætter $\alpha = \beta = 0.05$. De to grænser kan så beregnes med formlerne

$$L_C = k_\alpha \sqrt{2B}, \tag{4}$$

$$L_D = L_C + \frac{k_\beta^2}{2}\left(1 + \sqrt{1 + \frac{4L_C}{k_\beta^2} + \frac{4L_C^2}{k_\alpha^2 k_\beta^2}}\right), \tag{5}$$

hvor k_α og k_β er abscissen i en standard normalfordeling svarende til sandsynlighedsniveauet $1-\alpha$ og $1-\beta$ henholdsvis.
Når et resultat vises for brugeren rapporteres det målte signal i aktivitet, hvorfor både usikkerheden på følsomheden og usikkerheden fra tællestatistikken spiller ind. Aktiviteten er

$$A = \frac{S/t}{\kappa}, \tag{6}$$

hvor t er måletiden, som antages at være uden usikkerhed. Fra propagering af usikkerheder fås usikkerheden på aktiviteten til

$$\sigma_A = \frac{1}{\kappa}\sqrt{\frac{\sigma_S^2}{t^2} + A^2\sigma_{\overline{\kappa}}^2} \tag{7}$$

Hvis $S > L_C$ angives et observeret signal af værdien $A \pm z_{1-\gamma/2}\sigma_A$, hvor $z_{1-\gamma/2}$ er den kritiske værdi på en standard normalfordeling svarende til et sandsynlighedsniveau på $1-\gamma/2$.
Hvis i stedet $S \leq L_C$ angives intet signal, og der rapporteres en øvre grænse på den sande værdi af signalet på $A + z_{1-\gamma}\sigma_A$. Bemærk her det ensidede konfidensinterval ($1-\gamma$ i stedet for $1-\gamma/2$), da vi kun rapporterer en øvre grænse.
I *Radex* er γ sat til 0.05 som udgangspunkt.

Litteratur

[1] L. A. Currie, *Limits for qualitative detection and quantitative determination. Application to radiochemistry*, *Analytical Chemistry* **40** (1968) 586 [https://doi.org/10.1021/ac60259a007].