

УДК 543.429.3+517.443

Поп О.М., інж., Стець М.В., н.с.; Маслюк В.Т., д.ф.-м.н., проф.

ПРЯМИЙ ТА ОБЕРНЕНИЙ БУТСТРЕП-МЕТОДИ В ЗАДАЧАХ ОБРОБКИ ДАНИХ ЯДЕРНОЇ ГАММА-СПЕКТРОМЕТРІЇ ЗРАЗКІВ КЕРАМІКИ

*Інститут електронної фізики НАН України, 88017, м. Ужгород,
вул. Університетська, 21, e-mail: oksana_por@i.ua.*

Вступ

Бутстреп методи набули широкого поширення і величезну популярність у галузі прикладної статистики. Бутстреп-метод використовується для малих вибірок [1]. Його використовують для оцінки широкого спектру статистичних функцій, включаючи дисперсії, функції розподілу. Для точного розрахунку бутстреповських оцінок потрібно робити повторні виміри, а також обчислювати ймовірності та значення статистики, які пов'язані з кожним повторним виміром зразка [1]. Повторні виміри однієї і тієї ж величини постійного розміру здійснюється при умовах кращої точності вимірювань.

Ядерна гамма-спектрометрія широко використовується для визначення радіонуклідів. Даний метод має досить багато переваг [2, 3]. Структура отриманих після виміру гамма-спектрів є простою. Однак дуже важко аналізувати спектр, коли фотопік маленький.

Метою статистичних методів є отримання даних в компактному, зручному і наочному вигляді, узагальнення їх за допомогою математичних моделей і розробка рішень про подальші оптимальні дії. У збірнику статей відомого американського статистика, професора Стенфордського університету Б. Ефрона обговорюється новий метод обробки статистичних даних, який називається «бутстреп» [4].

Бутстреп-метод спочатку виник як засіб подолання вибіркового зміщення або, у всякому разі, як засіб його істотного зменшення [5].

Принцип рандомізації, запропонований Р. Фішером [6]. Рандомізація – штучне внесення випадковості в експеримент для

перетворення деяких систематичних помилок у випадкові. У цій ролі зазвичай виступають таблиці або генератори випадкових чисел. Якість одержуваних випадкових чисел має велике значення у всіх областях їх використання, в тому числі і в бутстрепі. Таким чином, рандомізація Р. Фішера направлена на експеримент, а бутстреп Б. Ефрона – на обробку даних проведеного експерименту (що, звичайно, не виключає рандомізації експериментів).

Крім понять зсуву і рандомізації, знадобиться і поняття повторних (паралельних) дослідів. Звичайно, ідея про багаторазове повторення дослідів в однакових, наскільки можливо, умовах з'явилася задовго до Р. Фішера. Вона була одним з основних принципів наукового дослідження. Б. Ефрон, переніс рандомізацію на процедури обробки даних. Уявлення про рандомізації і повторне спостереження надали глибокий вплив на теорію планування експерименту.

Бутстреп-процедура може розглядатися як спосіб управління вибіркою в ході обробки даних. Традиційна область управління вибіркою – планування експериментів. При традиційному підході, якщо вибірка задана, то для отримання найбільш ефективних оцінок і для перевірки гіпотез критеріями з найбільшою потужністю треба використовувати всі вибіркові спостереження до одного. Виключення з розрахунку кожного спостереження означає зменшення на одиницю числа ступенів свободи з усіма витікаючими наслідками.

1. Бутстреп-методи в ядерній гамма-спектрометрії

Бутстреп-метод використовується для збереження і підвищення аналітичних

можливостей ядерної гамма-спектрометрії у задачах, де існують обмеження на отримання достатньо високих статистик відліків і загальну тривалість ядерної гамма-спектрометрії. Також дуже часто зустрічається ситуація, коли на деякий сигнал накладається шум. Після виміру отримуємо апаратурні гамма-спектри (АГС). Для того аби в АГС позбутися шуму використовують різні методи – великі маси зразків, великий час виміру та повторні виміри. Однак кожний з цих методів має свої недоліки – не завжди можна отримати велику масу зразка та проводити виміри протягом довгого часу. Для збільшення ймовірності виділення слабких сигналів у фоні використовують бутстреп-методи [5]. Бутстреп відрізняється від традиційних методів тим, що він передбачає багаторазову обробку різних частин одних і тих же даних і зіставлення отриманих, таким чином, результатів. Кількість вимірів (повторів) n – ззовні заданий параметр, оскільки збільшення позитивних повторів збільшує ймовірність прийняття рішення «сигнал – інваріант (не шум)», тому збільшуємо загальну кількість n вимірів [5]:

$$n = \frac{T}{\Delta T} \quad (1)$$

Апаратурні гамма-спектри, отримані в результаті ядерної гамма-спектрометрії, обробляються SBS-40. Тому, при повторних коротких вимірах, видно, що обробка АГС – сум може давати різні результати: напр., ідентифікувати / не ідентифікувати деякі фотопіки. В АГС ділянки, де знаходяться сигнали, внаслідок цього будуть мати різні значення критерію "трех корнів з фону" для прийняття рішення «сигнал > фон». Для перевірки нашого методу була побудована модель, в якій знайдений статистичний критерій α , який називають критерієм Бормана [5, 7].

Отже, метою роботи є дослідження можливостей бутстреп-методів для вирішення задач прикладної ядерної гамма-спектрометрії.

2. Експериментальна частина

Для зразків кераміки розроблені і розглядаються різні типи бутстреп-методів (у

задачах ядерної гамма-спектрометрії низької природної радіоактивності нуклідів (питома активність ≤ 10 Бк / кг)):

Прямий бутстреп (збільшення кількості елементів у вибірці) – метод базується на застосуванні не великої тривалості вимірювань. У якості елементів вибірки використовуються суми апаратурних гамма-спектрів (АГС), комбінаторно одержані з АГС менших тривалостей.

Нехай А, В, С, Д – стартові АГС. Тривалість виміру кожного з них ТС. Тоді їх комбінаторні суми:

$$AB = A+B, AC = A+C, \dots,$$

$$ACD = A+C+D \text{ і т.д.,}$$

Отримані суми можна розглядати як нові додаткові АГС – додаткові виміри. Таким чином, можна комбінаторно отримати множину АГС, маючи певну і обмежену кількість «стартових» АГС. На рис. 1 наведена залежність I , імп/сек від комбінацій апаратурних гамма-спектрів для енергії 1460 КеВ (^{40}K) зразка кераміки.

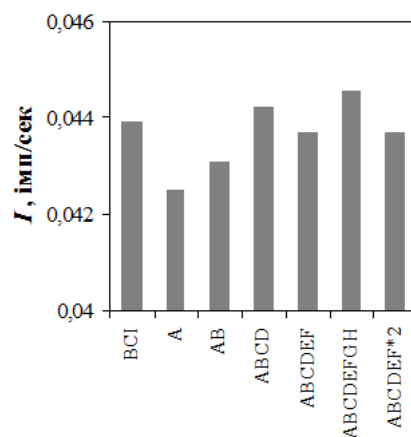


Рис. 1. Залежність I , імп/сек від комбінацій апаратурних гамма-спектрів для енергії 1460 КеВ (^{40}K) у зразку кераміки.

Дана технологія дозволяє отримати додаткову множину АГС, у якій здійснюється пошук потрібних піків. Таким чином, використовуються такі властивості лінії в АГС, як самоподібність та інваріантність.

Обернений бутстреп (зменшення кількості елементів у вибірці) – метод використовує відомий метод зменшення дисперсії значень шляхом виключення точок на «хвостах» розподілу частотей їх значень. При цьому виконується умова робастності – стійкості середнього значення всіх значень. Тут у якості елементів вибірки

використовують результати обробки АГС, напр., гамма-активності або інтенсивності нуклідів. На рис. 2 наведені розподіли частот для оберненого бутстрепу у зразку кераміки. Для побудови знаходились нормалізовані значення інтенсивностей I , які визначені за допомогою функції НОРМАЛІЗАЦІЯ у програмі MS Excel.

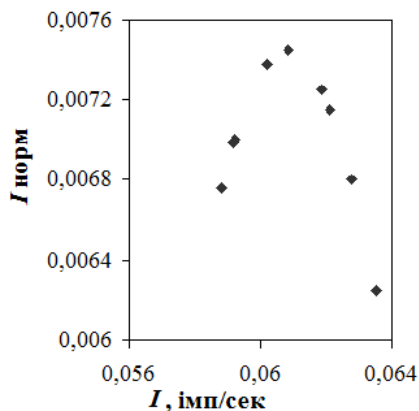


Рис. 2. Залежність $I_{\text{норм}}$ від інтенсивності I , імп/сек для енергії 1460 KeV (^{40}K) у зразку кераміки.

Вибірка зменшується аби зменшити дисперсію. Межею є мінімальна дисперсія, при якій зберігається середнє значення та тип розподілу (його симетричність).

Звичайний бутстреп (збільшення кількості вибірок) – модифікація двох попередніх методів: використовує штучне розмноження вибірок. Звичайний метод служив в якості деякого опорного методу. У даному випадку основою була ідея бутстреп-методу [8] – розмноження вибірок: спочатку здійснюють розрахунки для всієї множини точок; потім цю множину розкладають на k підмножин, і повторюють розрахунки, послідовно відкидаючи кожну із підмножин. Цей метод називають методом «складного ножа» (Тьюкі). Модифікацією є розгляд всієї підмножини, з послідовним виключенням однієї точки. Зрозуміло, що в цих методах збільшується кількість підмножин.

Комбінований бутстреп – комбінація прямого та оберненого бутстрепа. Як критерій нами використовується коефіцієнт k , який рівний $1/\sqrt{I \cdot TC}$. На рис. 4 – 6 наведені залежність k від часу виміру апаратних гамма-спектрів TC , сек для енергії 609 KeV (^{214}Bi) (див. рис. 4), 1460 KeV

(^{40}K) (див. рис. 5), 1764 KeV (^{214}Bi) (див. рис. 6) у зразках кераміки.

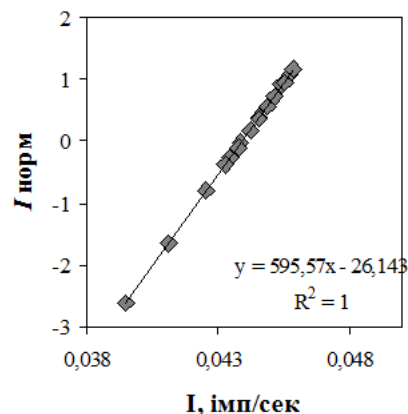


Рис. 3. Залежність $I_{\text{норм}}$ від інтенсивності I , імп/сек для енергії 1460 KeV (^{40}K) у зразку кераміки.

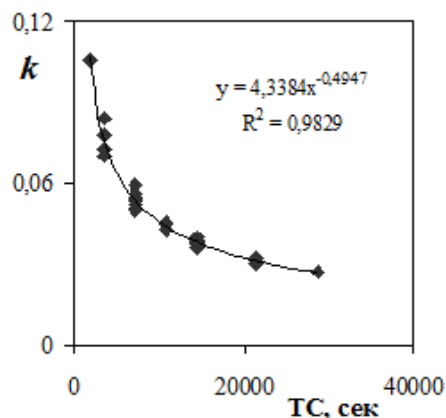


Рис. 4. Залежність k від часу виміру апаратних гамма-спектрів TC , сек для енергії 609 KeV (^{214}Bi) у зразку кераміки.

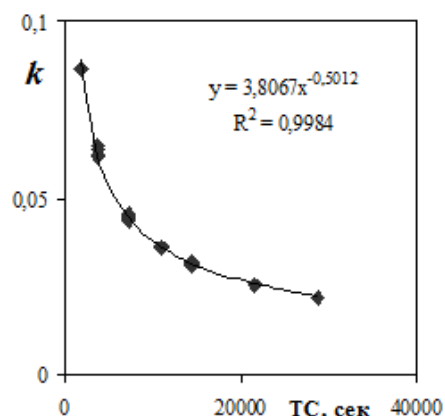


Рис. 5. Залежність k від часу виміру апаратних гамма-спектрів TC , сек для енергії 1460 KeV (^{40}K) у зразку кераміки.

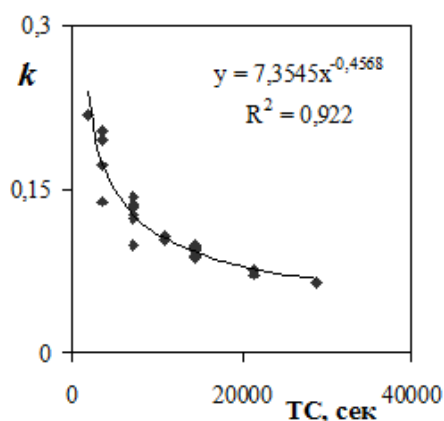


Рис. 6. Залежність k від часу виміру апаратних гамма-спектрів ТС, сек для енергії 1764 КеВ (^{214}Bi) у зразку кераміки.

Частина матеріалу представлена на конференції молодих учених та аспірантів "ІЕФ'2013".

Висновки

Бутстреп-методи використовуються для збереження і підвищення аналітичних можливостей ядерної гамма-спектрометрії у задачах, де існують обмеження на отримання достатньо високих статистик відліків і загальну тривалість ЯГС.

Розглядаються різні типи бутстреп-методів у зразках кераміки, (тобто у задачах ЯГС низької природної радіоактивності нуклідів (питома активність ≤ 10 Бк/кг)). Використовуючи різні типи бутстреп-методів, можна виявити аналітичний сигнал, відділити сигнал від шуму.

Стаття надійшла до редакції: 06.10.2014.

DIRECT AND REVERSE BOOTSTRAPS – THE METHODS USED IN THE PROBLEMS OF PROCESSING THE NUCLEAR GAMMA-SPECTROSCOPY DATA PROCESSING OF CERAMIC SAMPLES

Pop O.M., Stets M.V., Maslyuk V.T.

The practical examples of using the direct (increase of the number of elements in the sample), reverse (reduction of the number of elements in the sample) and normal (increase the number of samples) bootstraps (the methods used in the problems of applied nuclear gamma-spectrometry of the natural nuclide activity) have been considered.

Бутстреп-процедура може розглядатися як спосіб управління вибіркою в ході обробки даних. Описані бутстреп-методи показали, що вони придатні для малих вибірок.

Список використаних джерел

1. Nicholas I. Fisher, Peter Hall. Bootstrap algorithms for small samples. *Journal of Statistical Planning and Inference*. 1991, 27, 157-169.
2. Поп О.М. Часова залежність інтерференцій аналітичних ліній радіоактивних нуклідів рядів ^{232}Th , ^{235}U та ^{238}U . *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика*. 2012, 32, 45-50.
3. Guillot L. Extraction of full absorption peaks in airborne gamma-spectrometry by filtering techniques coupled with a study of the derivatives. Comparison with the window method. *Journal of Environmental Radioactivity*. 2001, 53, 381-398.
4. Эфрон Б. Нетрадиционные методы многомерного статистического анализа: Сб. статей. М.: *Финансы и статистика*, 1988. С. 263.
5. Поп О.М. Використання Фур'є-, Вейвлет-фільтрації та бутстреп-метод при обробці слабких піків в апаратних гамма-спектрах. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика*. 2014, 35, 150-156.
6. Шитиков В.К., Розенберг Г.С. Рандомизация и бутстреп: статистический анализ в биологии и экологии с использованием R. Тольятти: *Кассандра*, 2013. С. 314.
7. Тустановский В.Т. Оценка точности и чувствительности активационного анализа. М.: *Атомиздат*, 1976. С. 192.
8. Большаков А.А., Каримов Р.Н.. Методы обработки многомерных данных и временных рядов. М.: *Горячая линия-Телеком*, 2007. С. 522.