ANALYSE PROBABILISTE DES MESURES NUCLEAIRES A BAS NIVEAU PARTIE 1 : APPROCHE BAYESIENNE SOUS HYPOTHESE POISSONIENNE

A.VIVIER[1], S.PUYDARRIEUX[2], G.MANIFICAT[3], M.MOKILI[4], C.RIVIER[5] L.TENAILLEAU[6], J.P. DUVAIL[7], B.THAUREL[8] M.CROZET[9], R.LE MEIGNEN[10], E.BOHAUD[11], V.BRUEL[12] G.LE PETIT[13], J.AUPIAIS[13], H.GUEGAN[14], C.COSSONNET[15], J. GUO[16], , P. TRANCHANT[17], J.FAZILEABASSE[18], X. MICHEL[19]

[1] Institut National des Sciences et Techniques nucléaires CEA/Saclay 91191 Gif sur Yvette Cedex, France.
[2] AREVA-NC/La Hague/ Etudes Procédés et Statistiques – 50444 Beaumont Hague cedex, France
[3] IRSN, Direction de l'environnement et de l'Intervention
[4]Laboratoire SUBATECH – UMR 6457: Ecole des Mines de Nantes, IN2P3/CNRS, Université de Nantes
[5]CEA Marcoule DEN/DRCP/CETAMA - BP 17171, 30207 Bagnols-sur-Cèze cedex, France
[6]Groupe d'Etudes Atomique/ Marine Nationale 50100 Cherbourg-Octeville
[7]LASEM/LSR/ BCRM - BP61 83800 Toulon cedex 09
[8]RSN PDS-DEND/SATE Fontenay-aux-Roses
[9]CEA/DEN/DRCP/SERZ/LED
[10]EDF - DIN - CEIDRE, Département Laboratoires/CNPE de Chinon, BP 23, 37420 Avoine, France
[11]ANDRA DI/CA/LAC, BP7, 10200 Soulaines dhuys
[12]AREVA-NC/Pierrelatte, SET/DG/IPE, Site du Tricastin, 26700 Pierrelatte Cedex
[13]CEA, DAM, DIF , F-91297 Arpajon, France
[14]Centre d'Etude Nucléaire de Bordeaux-Gradignan, CNRS/IN2P3 Bordeaux, France
[15]IRSN Laboratoire de mesure de la radioactivité dans l'environnement Orsay, France
[16]ORTEC-AMETEK Inc, 801 S. Illinois Ave., Oak Ridge, TN 37830, USA.
[17]Techman Industrie 7 rue des Boisses 37500 Chinon France
[18] EDF/ DPN /GPRE - Ingénierie Radio Protection1 Place Pleyel 93282 St Denis Cedex
[19] Service de protection radiologique des armées, Clamart

Résumé
Depuis sa parution, des critiques ont été émises à l'encontre de la norme ISO 11929-2010 portant sur les limites caractéristiques d'une mesure nucléaire.La première partie de cet article présente une méthode bayesienne fondée sur l'hypothèse poissonienne et une dialectique cause-effet de l'acte de mesure, permettant d'accéder à des informations pertinentes, y compris en dessous du seuil de décision.La seconde partie détaille point par point le contenu de la norme ISO 11929-2010, et propose des pistes en vue de sa révision prochaine.

Key words : decision threshold , detection limit, uncertainty, Bayesian method, Poisson law

1 INTRODUCTION

L'approche bayesienne qu'Henri Poincaré appelait explicitement « la probabilité des causes », s'inscrit dans une dialectique cause – effet qui met en évidence le rôle fondamental des hypothèses utilisées.L'analyse statistique et probabiliste des mesures peut se faire suivant deux optiques :

- La première, statistique, s'intéresse à la fluctuation des mesures. C'est dans cette approche « fréquentiste » qu'émerge le concept de seuil de décision associé au risque de première espèce.
- La seconde, probabiliste, s'intéresse à l'estimation des valeurs vraies à partir des mesures. C'est dans cette approche « bayesienne » qu'émerge le concept d'incertitude.

Il est inutile d'opposer ces deux approches, car elles sont indissociables comme les deux faces d'une même pièce. Le formalisme bayesien permet, par un mécanisme d'inversion, d'établir les liens entre ces deux point de vue. On peut ainsi être à la fois fréquentiste et bayesien. La détermination bayesienne du seuil de décision, concept fréquentiste, à partir d'une mesure unique du bruit de fond en est un bel exemple.

La problématique des mesures nucléaires à bas niveau apparait avec un échantillon pour lequel l'approche classique des incertitudes (GUM) donne l'intervalle de confiance $[-11\ Bq\ ,+7\ Bq]$. Deux problèmes émergent.

- Cet intervalle s'étend sur une partie négative dénuée de sens physique. Cette incohérence ne peut pas être éliminée d'un simple coup de crayon *a posteriori*. Une approche probabiliste cohérente doit intégrer *ab initio* cette contrainte.
- La valeur $0\ Bq$ est contenue dans l'intervalle. L'hypothèse que cet échantillon soit non radioactif ne peut pas être écartée. Une approche probabiliste complète doit permettre de calculer la probabilité de cette hypothèse.

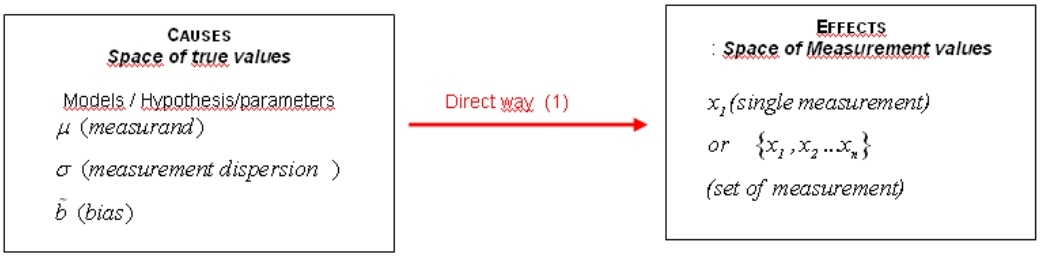
Cet article propose de montrer que cette approche est possible et apporte aux utilisateurs des informations pertinentes lorsqu'un échantillon est mesuré en dessous du seuil de décision. Ce seuil n'est alors plus un mur opaque en dessous duquel une mesure est simplement jugée « *non significative* ».

2 DESCRIPTION FREQUENTISTE ET INVERSION BAYESIENNE

2.1 DIALECTIQUE CAUSE - EFFET

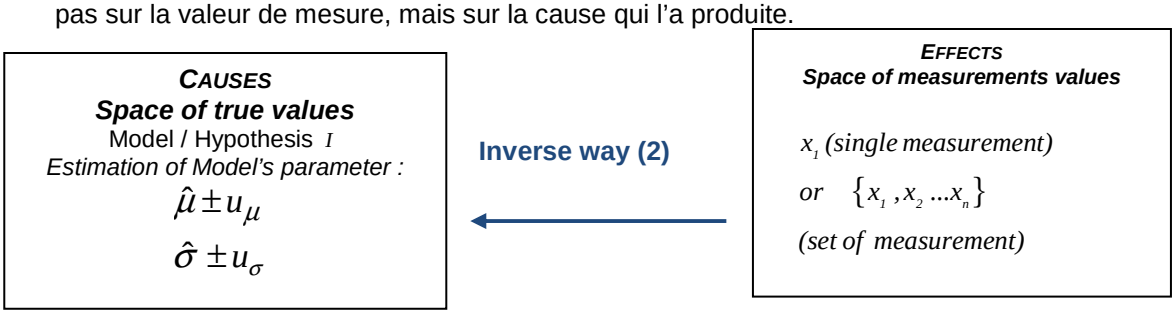
En percevant le mesurande comme une cause et la valeur de mesure comme un effet, on distingue deux sens dans l'interprétation de l'acte de mesure :

- **Le sens direct des causes vers les effets.** Il correspond à la prévision des effets sachant les causes (*graphe 1*) et permet de déterminer les lois de probabilités fréquentistes décrivant la fluctuation des mesures. Le seuil de décision associé à un risque de première espèce se conçoit dans ce sens. Il nécessite la construction de la distribution des valeurs de mesures sous l'hypothèse préférentielle H_0 d'un échantillon non radioactif (*Kauffmann 1994, Saporta 1990*).



Graphe 1 : dialectique cause-effet, sens direct

- **Le sens inverse des effets vers les causes.** Il correspond à la démarche consistant à estimer la valeur vraie du mesurande à partir des valeurs de mesures (graphe 2). C'est dans cet acte d'estimation qu'émerge le concept d'incertitude de mesure. L'incertitude porte, non pas sur la valeur de mesure, mais sur la cause qui l'a produite.



Graphe 2 : dialectique cause-effet, sens inverse et incertitude sur les paramètres

Cette inversion permettant de passer de l'espace des effets à l'espace des causes est formalisée par le théorème de Bayes. L'estimation projette la valeur de mesure dans l'espace des valeurs vraies. Lors de cette projection, la valeur de mesure change de statut, et doit donc être compatible avec l'espace des valeurs vraies. L'importance de cette compatibilité est en général ignorée car elle est le plus souvent naturellement respectée. Cela n'est pas toujours vrai : une mesure nucléaire nette négative, toujours possible, ne peut pas être projetée dans l'espace des valeurs vraies positives ou nulles. Dans ce cas, le formalisme bayesien permet de construire, à partir d'une telle mesure négative, un estimateur positif de la valeur vraie.

La notation utilisée doit permettre de distinguer la valeur vraie, son estimateur et les valeurs de mesures. Nous adopterons la notation suivante :

- La valeur vraie *du mesurande*, réputée unique, sera notée $\tilde{y}$, l'activité moyenne vraie $\tilde{A}$, et la moyenne vraie du comptage $\tilde{N}$ ou μ. L'écart-type de dispersion des mesures sera noté dispersion σ

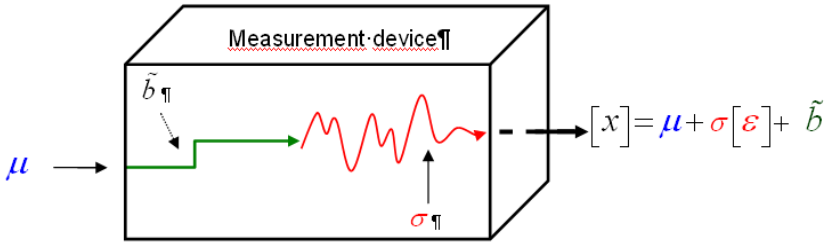
- Un estimateur de la valeur vraie sera noté $\hat{y}$ (resp $\hat{\mathcal{A}}$ et $\hat{N}$).
- Une variable aléatoire sera notée $[y]$(resp $[\mathcal{A}]$ et $[N]$), soulignant son caractère mathématique abstrait.
- Une valeur de mesure, réalisation de la variable aléatoire précédente, sera notée y (resp $\mathcal{A}$ et N) avec des indices en cas de répétition : y_i, (resp $\mathcal{A}_i$ et N_i).

Avec ces notations, le concept d'incertitude $u(y)$ au sens du GUM [2] émerge clairement lorsque l'on considère une valeur de mesure y comme un estimateur $\hat{y}$ de la valeur vraie $\tilde{y}$. Pour le seuil de décision et la limite de détection nous utiliserons aussi bien les notations de Currie que celles de la norme ISO 11929, soit respectivement L_C ou y^* et L_D ou $y^{\#}$.

2.2 DESCRIPTION FRÉQUENTISTE DE LA MESURE. APPROCHE SIMPLIFIEE DU SEUIL D EDECISION

Les résultats de mesure x_i sont des réalisations indépendantes d'une variable aléatoire modélisée par (cf *graphe 3*):

$$[x] = \mu + \sigma[\varepsilon] + \tilde{b} \quad \textbf{(1)}$$



Graphe 3 : Modélisation de la variable mesure dans le sens direct

Ce modèle, correspondant au sens direct, a trois paramètres :

- μ : la valeur vraie du mesurande
- $\tilde{b}$: la valeur vraie d'un biais éventuel
- σ : la dispersion physique mesurable des mesures autours de $\mu + \tilde{b}$

Cette modélisation mécaniste simplifiée permet de comprendre aisément comment s'élabore un seuil de décision à partir de la distribution de mesures nettes d'un échantillon non radioactif (*hypothèse nulle* H_0)construite comme la différence de deux variables aléatoires de bruit de fond indépendantes et identiquement distribuées (*variables iid*) $[x_0]_1$ et $[x_0]_2$

$$[x_{0Net}] = [x_0]_1 - [x_0]_2 = \left(\cancel{\mu_0} + \sigma_0[\varepsilon]_1 + \cancel{\tilde{b}}\right) - \left(\cancel{\mu_0} + \sigma_0[\varepsilon]_2 + \cancel{\tilde{b}}\right) = \sigma_0[\varepsilon]_1 - \sigma_0[\varepsilon]_2 \quad \textbf{(2)}$$

Les valeurs vraies du bruit de fond et du biais disparaissent dans la différence, et avec elles leurs incertitudes. Le seuil de décision L_C est la valeur de mesure respectant, sous hypothèse H_0, la contrainte d'un risque de première espèce ou risque α

$$P\left(x_{0Net} \geq Lc \middle| H_0\right) = \alpha \quad \textbf{(3)}$$

Le seuil de décision est alors :

$$L_C(x_{Net}) = k_{1-\alpha}\sqrt{Var\left([x_{0Net}]\right)} = k_{1-\alpha}\sqrt{Var\left(\sigma_0[\varepsilon]_1\right) + Var\left(\sigma_0[\varepsilon]_2\right)} = k_{1-\alpha}\sqrt{2\sigma_0^2} = k_{1-\alpha}\,\sigma_{H_0} \quad \textbf{(4)}$$

Le seuil de décision est lié à la nature de la dispersion du signal de bruit de fond, déterminant $k_{1-\alpha}$, et à son amplitude, déterminant σ_0. Ces deux grandeurs peuvent être estimées expérimentalement avec une précision suffisante par une série d'environ 30 mesures du bruit de fond. La description plus complète d'une variable aléatoire nécessite de connaitre sa densité de probabilité conditionnelle

d'obtenir la valeur de mesure x « *sachant les paramètres* μ *et* σ » : $f\left(x\middle|\mu;\sigma\right)$

2.3 INVERSION BAYESIENNE, FONCTION DE VRAISEMBLANCE, INCERTITUDE ET LOI DE PROBABILITÉ ASSOCIÉE

2.3.1 THÉORÈME DE BAYES

l'estimation des paramètres du modèle à partir des valeurs de mesures serait incomplète sans informations ou hypothèses supplémentaires notées I. Le théorème de Bayes permet d'inverser la loi de probabilité conditionnelle fréquentiste $f\left(x\middle|\mu;\sigma\right)$ pour obtenir, dans une optique inversée, la loi de probabilité $h\left(\mu;\sigma\middle|\{x_i\};I\right)$ des paramètres du modèle *« sachant les valeurs de mesures »*. Avec la notation adoptée, le théorème de Bayes s'écrit de façon simplifiée :

$$h\left(\mu;\sigma\middle|\{x_i\};I\right)=C\,f\left(\{x_i\}\middle|\mu;\sigma;I\right)\,g\left(\mu;\sigma\middle|I\right)\text{ avec}$$

- $h\left(\mu;\sigma\middle|\{x_i\};I\right)$: loi ou densité de probabilité *a posteriori* des paramètres vrais sachant les valeurs de mesures et les informations I.
- $f\left(\{x_i\}\middle|\mu;\sigma;I\right)$: fonction de vraisemblance des paramètres en fonction des mesures.
- $g\left(\mu;\sigma\middle|I\right)$: loi de probabilité *a priori* des paramètres ou **prior**.
- C : constante de normalisation assurant une surface totale de 100 % de la loi *a posteriori.*

Nous utiliserons ici des prior constants, notamment pour le mesurande : $g\left(\mu\middle|I\right)=cte$. Une telle considération intuitive se justifie par le *principe de Bernouilli* (équiprobabilité) en l'absence, avant toute mesure, d' hypothèses particulières sur le mesurande. Par contre, pour ne pas être impropres, ils doivent être définis sur un intervalle borné $\left[a;b\right]$.

2.3.2 EXEMPLES DE CONSTRUCTION ET D'UTILISATION DES FONCTIONS DE VRAISEMBLANCE

Nous nous placerons dans ces exemples sous l'hypothèse I du caractère gaussien des variables. On considère un processus physique générant (*sens direct*) des valeurs de mesures x d'occurence modélisée par la loi $\mathcal{N}\left(x\middle|\mu;\sigma_0;I\right)$. L'écart-type de dispersion σ_0 est supposé connu *a priori* sans incertitude.

Application 1 : Loi *a posteriori* associée à une mesure unique x_1 décrivant l'incertitude

On effectue une mesure unique x_1, et l'on souhaite estimer la valeur vraie μ à partir de cette mesure x_1 (*sens inverse*). La fonction de vraisemblance n'est autre que la fonction $\mathcal{N}\left(x_1\middle|\mu;\sigma_0;I\right)$ où le paramètre μ joue maintenant le rôle de variable et la valeur de mesure x_1 le rôle du paramètre fixe. Cette inversion est l'essence même de l'approche bayesienne. Le théorème de Bayes permet d'obtenir une loi de probabilité *a posteriori* de la « variable » μ :

$$h\left(\mu\middle|x_1;\sigma_0;I\right)=C\mathcal{N}\left(x_1\middle|\mu;\sigma_0;I\right)\,g\left(\mu\middle|I\right)$$

Avec une loi *a priori* $g\left(\mu\middle|I\right)$ constante et bornée, la loi de probabilité *a posteriori* de μ est la loi normale $\mathcal{N}\left(\mu\middle|x_1;\sigma_0\right)$, centrée sur la valeur de mesure x_1 et d'écart-type σ_0. Cette loi ne décrit plus une fluctuation physique mesurable, mais le manque de connaissance sur la position de la valeur vraie par rapport à la valeur de mesure. Nous sommes ici au point focal du concept d'incertitude.

Chaque réalisation de cette variable aléatoire $\left[\mu\right]$ représente une nouvelle estimation $\hat{\mu}$ possible de la valeur vraie. La valeur particulière $\hat{\mu}=x_1$ n'est autre que l'estimateur du maximum de vraisemblance. L'écart-type de cette loi, numériquement égal à l'écart-type initial de dispersion σ_0, n'est autre que l'incertitude-type classique u (*incertitude de type B*).

La probabilité que la valeur vraie se trouve dans un intervalle $[\mu_1, \mu_2]$ quelconque est $P(\mu \in [\mu_1, \mu_2]) = \int_{\mu_1}^{\mu_2} \mathcal{N}(\mu | x_1 ; \sigma_0)\, d\mu$.

Cette approche ne pose aucun problème tant que la valeur de mesure n'est pas trop proche des bornes du prior. La modélisation mécaniste d'une telle loi de probabilité s'écrit :

$$[\hat{\mu}] = x_1 + u[\varepsilon] \quad \textbf{(5)}$$

Application 2 : les tests d'hypothèses

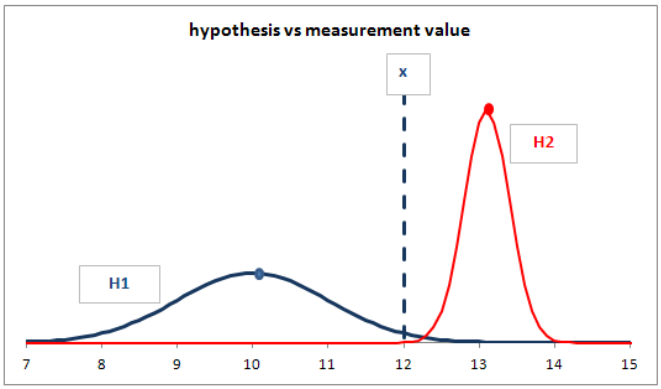
Supposons que l'on soit amené, après avoir obtenu la valeur de mesure $x_1 = 12$, à décider entre deux hypothèses :

- **Hypothèse** H_1 : le système est modélisé par la loi normale $\mathcal{N}(\mu = 10; \sigma = 1)$
- **Hypothèse** H_2 : le système est modélisé par la loi normale $\mathcal{N}(\mu = 13; \sigma = 0{,}3)$

On calcule la valeur de vraisemblance de chacune des hypothèses pour x_1 :

- $H_1\ likelihood = \mathcal{N}(x_1 = 12 | \mu = 10 ; \sigma = 1) \approx 0{,}054$
- $H_2\ likelihood = \mathcal{N}(x_1 = 12 | \mu = 13 ; \sigma = 0{,}3) \approx 0{,}005$

L'hypothèse 1 est considérablement plus vraisemblable. Nous accepterons donc « selon toute vraisemblance » l'hypothèse 1 $(\mu = 10)$ et rejetterons l'hypothèse 2 $(\mu = 13)$ bien que la mesure soit plus proche de cette dernière (*graphe 4).*



Graphe 4 : hypothèse 1 et hypothèse 2 vs x=12

Cette démarche de rejet ou non d'hypothèse est à la base de l'utilisation du seuil de décision

2.3.3 LOI DE PROBABILITÉ FRÉQUENTISTE TENANT COMPTE DES INCERTITUDES SUR LES PARAMÈTRES

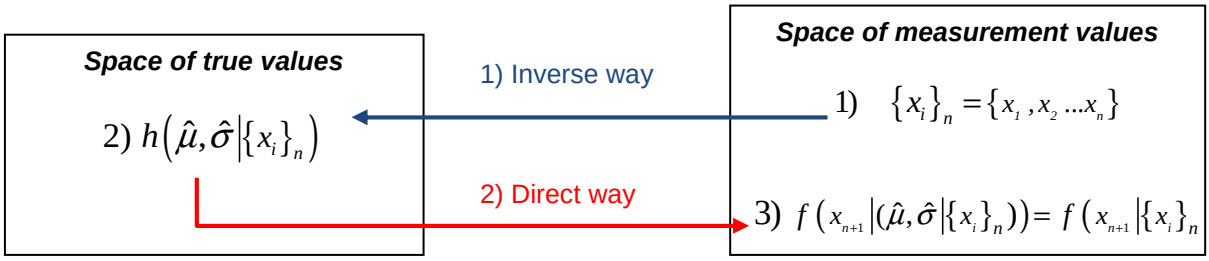
A partir de n premières mesures, on souhaite construire la loi d'occurence de la $(n+1)^{ième}$ mesure. C'est une loi de probabilité fréquentiste prévisionnelle construite à partir des paramètres estimés $\hat{\mu}$ et $\hat{\sigma}$ intégrant les incertitudes sur ces paramètres. Cette démarche met en œuvre successivement:

- Le sens inverse pour déterminer les lois de probabilités des paramètres « *sachant les valeurs de mesures* »
- le sens direct pour déterminer ensuite la loi de la variable « *sachant les lois de probabilités des paramètres vrais* » (*graphe 5*).

Cette seconde étape nécessite à nouveau l'application du théorème de Bayes. On voit ainsi que le formalisme bayesien s'applique aussi à des probabilités de natures fréquentistes.

La loi de probabilité de la $n+1^{ème}$ mesure sachant les n premières est une loi de Student de degré n :

$$f\left(x_{n+1}\middle|\{x_i\}\right)=T\left(\frac{x-\bar{x}_n}{s_{exp}};n\right)$$



Graphe 5 : construction d'une loi fréquentiste à partir d'un échantillon de mesures préalables

Les seuils de décision utilisés en mesure nucléaire obéissent à ce schéma. L'hypothèse H_0 se construit comme la loi de probabilité d'une seconde mesure connaissant une seule mesure du bruit de fond.. A partir d'une première mesure unique x_1 avec σ_0 connu, la modélisation d'une telle variable $\left[x_2\middle|x_1;\sigma_0\right]$ s'écrit :

$$\begin{cases}(5)\left[\hat{\mu}\middle|x_1;\sigma\right]=x_1+u[\varepsilon'] \\ (1)\left[x\middle|\mu;\sigma\right]=\mu+\sigma_0[\varepsilon]\end{cases}\Rightarrow\left[x_2\middle|\mu\middle|x_1;\sigma_0\right]=\left[x_2\middle|x_1;\sigma_0\right]=[\mu]+\sigma_0[\varepsilon]=x_1+u[\varepsilon']+\sigma_0[\varepsilon]$$

Sachant que dans ce cas là $u=\sigma_0$ (*incertitude de type B*) on obtient :

$$Var\left(\left[x_2\middle|x_1;\sigma_0\right]\right)=Var\left(\left[\mu\middle|x_1;\sigma_0\right]\right)+Var\left(\left[x_2\middle|\mu;\sigma_0\right]\right)=u^2+\sigma_0^2=2\sigma_0^2\Rightarrow\sigma(x_2)=\sqrt{2\sigma_0^2}$$

Cette expression permet d'obtenir un seuil de décision sur une statistique brute

$$L_C(x_{gross})=x_1+k_{1-\alpha}\sqrt{2\sigma_0^2}\quad\textbf{(6a)}$$

cohérente avec la relation **(4)** sur une statistique nette, au sens où $L_C(x_{gross})=x_1+L_C(x_{Net})$ **(6b)**.

3 DÉTERMINATION DE L'INCERTITUDE, DU SEUIL DE DÉCISION ET DE LA LIMITE DE DÉTECTION SOUS HYPOTHÈSE POISSONIENNE

3.1 PROPRIÉTÉS DES VARIABLES DE POISSON ET APPLICATIONS PHYSIQUES

Les réalisations d'une variable de Poisson sont des nombres entiers naturels $N\geq 0$. Sa loi de probabilité fréquentiste s'écrit: $P\left(N\middle|\mu\right)=\mu^N e^{-\mu}/N!$. Le paramètre unique μ prend ses valeurs dans l'espace des nombre réels positifs ou nuls $\mathbb{R}^+$: une telle loi n'est plus une loi de probabilité si $\mu<0$. La condition $\mu\geq 0$ ne résulte donc pas d'un choix *a prior,* car il n'y a pas d'alternative.

La loi de Poisson vérifie les propriétés suivantes :

- $E(N)=\tilde{N}=\mu$
- $Var(N)=\mu$

d'où la relation sur l'écart-type de dispersion : $\sigma=\sqrt{Var(N)}=\sqrt{\mu}$. Dans notre sujet, deux grandeurs physiques suivent en général des processus poissoniens :

- le nombre dn de noyaux instables qui se désintègrent dans une source radioactive d'activité $\mathcal{A}$ sur une durée dT , petite devant la période du radionucléide : $[dn]=\left[\frac{dn}{dT}dT\right]=[\mathcal{A}\,dT]$.
- La valeur de comptage brut N intégrée sur une durée T sous condition de non-empilement, est une réalisation d'une variable poissonienne $[N]$ de moyenne vraie $\tilde{N}=\mu$.

3.2 MODÉLISATION RÉALISTE DU RENDEMENT DE COMPTAGE

Une source d'activité vraie $\tilde{\mathcal{A}}$ génère un comptage net réel $[Net]_S$ suivant la relation:

$$[Net]_S = [\varepsilon][\mathcal{A}\,dT] \quad \textbf{(7a)}$$

Avec $[\varepsilon]$ la variable aléatoire «rendement » de moyenne vraie $\tilde{\varepsilon}$. Le caractère poissonien de la variable $[Net]_S$ et conjointement de la variable $[\mathcal{A}\,dT]$ impose à la variable rendement $[\varepsilon]$ d'être construite à partir de la relation (7a) comme le rapport de deux variables de Poisson indépendantes :

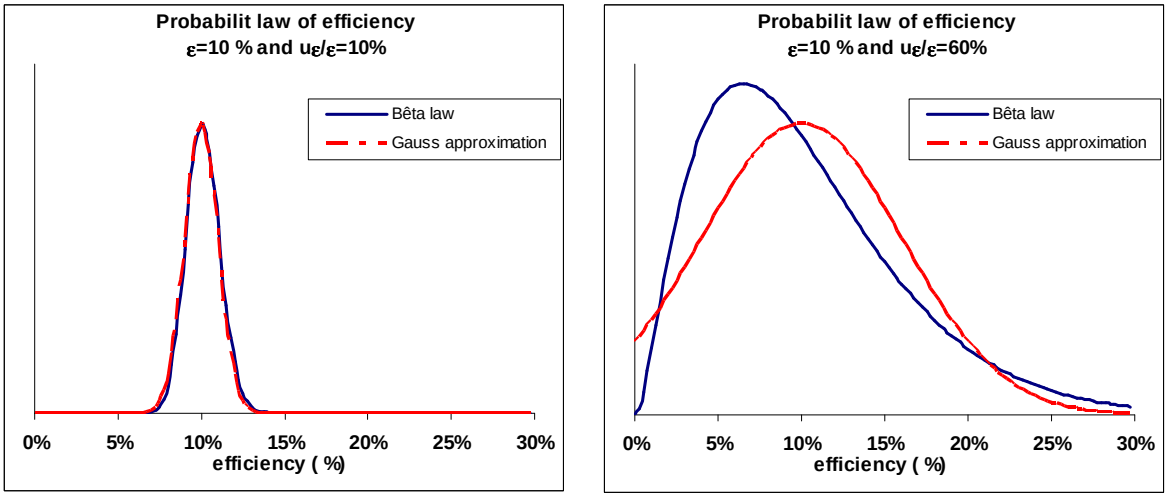
$$[\varepsilon] = [Net]_S / [\mathcal{A}\,dT] \quad \textbf{(7b)}$$

L'écart-type de la variable $[\varepsilon]$, caractéristique d'une proportion aléatoire, est égal à :

$$\sigma_\varepsilon = \sqrt{\tilde{\varepsilon}\,(1-\tilde{\varepsilon})/\tilde{N}et} \quad \textbf{(8)}$$

La relation **(8)** donne la fluctuation naturelle du rendement réel correspondant à la composante aléatoire de l'incertitude u_ε sur le rendement estimé lors de l'étalonnage. Dans certains cas, d'autres composantes, liées à des incertitudes de type B sont susceptibles d'augmenter significativement l'incertitude u_ε.

La variable rendement $[\varepsilon]$ peut être modélisée par une loi Bêta $\mathrm{B}(\alpha,\beta)$ de paramètres $\alpha = \tilde{\varepsilon}\left(\tilde{\varepsilon}-\tilde{\varepsilon}^2-u_\varepsilon^2\right)/u_\varepsilon$ et $\beta = (1-\tilde{\varepsilon})\left(\tilde{\varepsilon}-\tilde{\varepsilon}^2-u_\varepsilon^2\right)/u_\varepsilon$ (*Kirkpatrick et al., 2012*). Une telle loi, prenant ses valeurs entre 0 et 100 %, s'obtient par le rapport de deux variables de Poisson (*cf 7b*).



(a) ***(b)***

Graphe 6 : loi de probabilité du rendement (a) incertitude relative de 10 % - (b) incertitude relative de 60 %

Pour de faibles niveaux d'incertitudes relatives, la loi Bêta du rendement peut être approximée par une loi de Gauss (*graphe 6a*). Cette approximation n'est plus possible à partir d'incertitudes relatives $u_\varepsilon/\tilde{\varepsilon}$ supérieures à 30 % et présente deux défauts majeurs (*graphe 6b*) :

- Elle ne respecte plus l'asymétrie de la loi bêta
- Elle présente des probabilités significatives pour des valeurs négatives du rendement

Ces différences impactent la valeur des fractiles correspondant à un risque bêta donné et modifie considérablement le calcul des limites de détection.

3.3 PROPRIETES DU COMPTAGE NET ESTIMÉ PAR CORRECTION

La variable de comptage brut $[Gross]$ de paramètre μ_G d'un échantillon est une variable de Poisson

somme de deux variables de Poisson indépendantes : $[Gross] = [Net]_S + [bkG]_0$, avec

- $[Net]_S$ de paramètre μ_s, liée à l'activité de l'échantillon
- $[bkG]_0$ de paramètre μ_0, liée au bruit de fond ambiant

Le caractère indépendant de $[Net]_S$ et $[bkG]_0$ permet d'écrire $\sigma^2_{Gross} = \sigma^2_{Net} + \sigma^2_{BkG} = \mu_S + \mu_0 = \mu_G$, où l'on retrouve le caractère poissonien du comptage brut échantillon. La variable $[Net]_S$ étant inaccessible à la mesure, le modèle du comptage net corrigé s'écrit $[Net]_{est} = [Gross] - [bkG]_1$, où la variable $[bkG]_1$ correspond maintenant à une mesure indépendante du bruit de fond. La relation sur les écart-types s'écrit alors $\sigma^2_{Net\ est.} = \sigma^2_G + \sigma^2_0 = \mu_G + \mu_0 \neq \mu_S$, montrant que le comptage net estimé perd son caractère poissonien. C'est pour cette raison qu'à bas niveau, un comptage net estimé par correction du bruit de fond peut tout à fait être négatif sans pour autant être aberrant.

3.4 INVERSION BAYESIENNE SUR UNE STATISTIQUE BRUTE

3.4.1 LOI *A PRIORI* SUR LE PARAMÈTRE DE LA LOI DE POISSON

En négligeant la variation relative des noyaux par désintégration (*0,0015% pour le cobalt 60 en une heure*), le nombre de noyaux instables d un radionucléide donné dans un échantillon, est un nombre entier naturel constant $\tilde{n}$ positif ou nul . L'activité contenue dans un échantillon peut donc être considérée comme une valeur unique $\tilde{A} = \lambda \tilde{n}$, à son tour positive ou nulle. Nous utiliserons un prior $g(\mu|I)$ uniforme défini sur un intervalle borné $[0, \mu_{max}]$, 0 inclus. La borne supérieure μ_{max} peut être définie rationnellement en prenant, pour une durée de comptage T, la valeur $\mu_{max} = T/\tau$ avec τ le temps mort du système de mesure. Si la valeur vraie approche, voire dépasse la borne supérieure, mettant le prior en défaut, ce n'est pas ce dernier qui doit être reconsidéré, mais le process de mesure en raison d'un empilement trop important.

3.4.2 ESTIMATEUR BAYESIEN DU PARAMÈTRE DE LA LOI DE POISSON A PARTIR D'UNE MESURE BRUTE

A partir d'une mesure brute unique N_1, l'hypothèse poissonienne I permet d'obtenir la fonction de vraisemblance du mesurande μ : $f(N_1|\mu;I) = P(N_1|\mu) = \mu^{N_1} e^{-\mu} / N_1!$. Avec un prior $g(\mu|I)$ constant, on montre [*Vivier-Aupiais 2007*] que la loi *a posteriori* de la variable continue μ est une loi Gamma de paramètre N_1, définie pour tout $\mu \geq 0$ (*graphe 6, inverse way*) :

$$h(\mu|N_1;I) = \mu^{N_1} e^{\mu} / N_1! \quad \textbf{(9)}$$

Son espérance est : $E([\mu|N_1]) = N_1 + 1$ et sa variance : $Var([\mu|N_1]) = N_1 + 1$.

Ces relations permettent d'obtenir un estimateur ponctuel bayesien $\hat{\mu} = N_1 + 1$ et son incertitude associée $u(\hat{\mu}) = \sqrt{N_1 + 1}$. Cet estimateur diffère de l'estimateur classique $\hat{\mu}_{clas.} = N_1$. Cette différence prend tout son sens lorsque $N_1 = 0$: l'estimateur bayesien de la valeur vraie devient $\hat{\mu} = 1$ et non pas $\hat{\mu}_{class.} = 0$. Ce résultat est conforme à l'intuition : une première mesure nulle ne garantit pas que des mesures ultérieures seront toujours nulles, ce qui signifierait $\tilde{\mu} = 0$.

En utilisant la relation $\sigma = \sqrt{\mu}$, il est possible d'estimer la dispersion potentielle des mesures à partir d'une mesure unique par $\hat{\sigma} = \sqrt{\hat{\mu}} = \sqrt{N_1 + 1}$. L'incertitude associée à cette estimation est proche de $u(\hat{\sigma}) \approx 0{,}5$ quelle que soit la valeur du comptage N .

$$Demonstration: \quad \hat{\sigma} = \sqrt{N_1 + 1} \Rightarrow \frac{d\hat{\sigma}}{dN_1} = \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{N_1+1}} \Rightarrow d\hat{\sigma} = \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{N_1+1}} dN_1 \Rightarrow$$

$$Var([\sigma]) \approx \left(\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{N_1+1}}\right)^2 Var([\mu]) \Rightarrow u(\hat{\sigma}) \approx \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{N_1+1}} u(\hat{\mu}) \quad with\ u(\hat{\mu}) = \sqrt{N_1+1} \Rightarrow u(\hat{\sigma}) \approx 0{,}5$$

Cette propriété montre que l'écart-type de dispersion est très bien estimé à partir d'une mesure unique. Ce constat est fondamental tant pour la détermination de l'incertitude que du seuil de décision. L'approche bayesienne repose en grande partie sur la connaissance de la dispersion potentielle des mesures.

3.4.3 SEUIL DE DÉCISION SUR UNE STATISTIQUE BRUTE A PARTIR D'UNE MESURE UNIQUE DE BRUIT DE FOND

La loi de probabilité d'une seconde mesure BkG_2 du bruit de fond sachant une première mesure BkG_1, ou loi de l'hypothèse H_0, est *(graphe 6, direct way)* :

$$P\left(BkG_2 \middle| BkG_1; H_0, I\right) = \frac{1}{2^{BkG_1+BkG_2+1}} \frac{(BkG_1+BkG_2)!}{BkG_1!BkG_2!} \quad \textit{[Vivier, Aupiais 2007]}$$

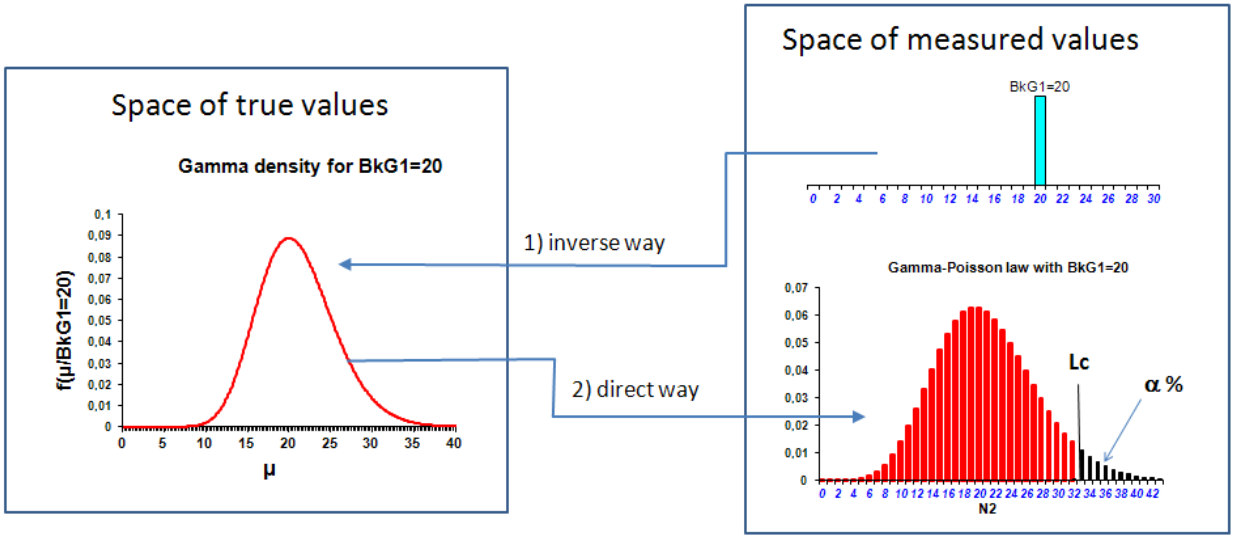
Cette loi discrète est une loi binomiale négative, appelée plus explicitement loi de mélange Gamma-Poisson, définie pour tout entier positif ou nul. Les opérateurs espérance et variance de cette loi sont $E([BkG_2]) = BkG_1 + 1$ et $Var([BkG_2]) = 2(BkG_1+1)$. Cette variance est le double de la variance de la loi de Poisson car elle tient compte à la fois de la dispersion poissonienne et de l'incertitude sur le paramètre μ. Le seuil de décision Lc associé à un risque α donné est :

$$P\left(BkG_2 \geq Lc \middle| BkG_1; H_0, I\right) = \sum_{BkG_2 > Lc} \frac{1}{2^{BkG_1+BkG_2+1}} \frac{(BkG_1+BkG_2)!}{BkG_1!BkG_2!} = \alpha$$

La valeur de Lc se calcule plus simplement, dans une modélisation mécaniste, comme $Lc(Gross) \approx E([BkG_2]) + k_{1-\alpha}\sqrt{Var([BkG_2])} = BkG_1 + 1 + k_{1-\alpha}\sqrt{2(BkG_1+1)}$ **(10)**

avec $k_{1-\alpha}$ le quantile de la loi normale.

Exemple : pour un risque alpha de 2,5%, $BkG_1 = 20 \Rightarrow Lc(Gross) \approx 34$ *(graphe 7)*



Graphe 7 : construction du seuil de décision brut à partir d'une mesure unique de bruit de fond

Ce résultat permet de calculer un seuil de décision lorsque le comptage unique de bruit de fond est nul : $BkG_1 = 0 \Rightarrow Lc(Gross) \approx 4$

3.5 INCERTITUDE ET INTERVALLE DE CONFIANCE SUR UNE STATISTIQUE NETTE

3.5.1 LOI *A POSTERIORI* DE LA VALEUR NETTE VRAIE μ_{Net}

L'objectif est d'obtenir une loi de probabilité de $\mu_{Net} = \mu_{Gross} - \mu_{BkG}$ à partir d'un comptage de bruit de fond BkG_1 et d'un comptage brut $Gross_1$. Ces deux valeurs indépendantes déterminent respectivement les densités de probabilité de μ_{BkG} : $h\left(\mu_{BkG} \middle| BkG_1 ; I\right)$ et de μ_{Gross} : $h\left(\mu_{Gross} \middle| Gross_1 ; I\right)$. La densité de probabilité de μ_{Net} s'obtient par le produit de convolution :

$$h\left(\mu_{Net} \middle| Gross_1 ; BkG_1 ; I\right) = \int_0^{+\infty} h\left(\mu_{Net} + \mu_{BkG} \middle| Gross_1 ; I\right) h\left(\mu_{BkG} \middle| BkG_1 ; I\right) d\mu_{BkG} \quad \textbf{(11)}$$

On note que :

1. μ_{Net} étant positif ou nul, le produit de convolution doit respecter la réalité physique $\mu_{Gross} \geq \mu_{BkG}$.
2. Le produit de convolution n'utilise pas le théorème de Bayes. Il ne fait pas intervenir de constante de normalisation. Les densités de probabilités obtenues pour chaque valeur sont déterminées de façon absolue.L'approche bayesienne est réalisée en amont pour la détermination des lois gamma.

3.5.2 PROBABILITÉ D'ÊTRE NON RADIOACTIF

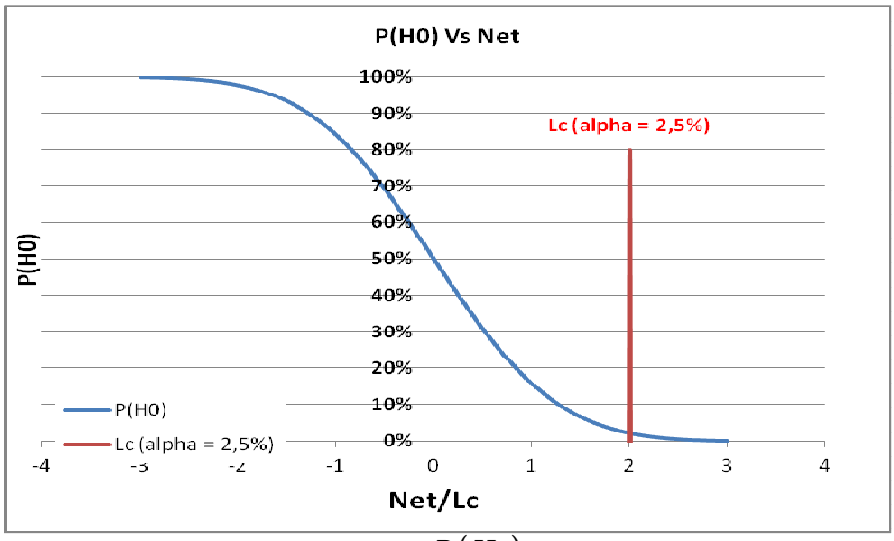
L'intégrale $S = \int_0^{+\infty} h\left(\mu_{Net} \middle| Gross_1 ; BkG_1 ; I\right) d\mu_{Net}$ sur toutes les valeurs possibles d'une loi de probabilité doit être égale à 1. Cet axiome des probabilités est respecté lorsque $Net_{est} >> L_C$. A l'inverse, si $Net_{est} < L_C$ la surface S est inférieure à 1. Le réflexe usuel dans ce cas est de normaliser $h\left(\mu_{Net}\right)$ en divisant par S. Une telle normalisation multiplicative augmente artificiellement la densité de probabilité initialement correcte de chaque valeur μ_{Net}, générant des effets aberrants (cf part. 2).

La valeur $\mu_{Net} = 0$ n'ayant aucun poids dans l'intégrale, on peut écrire $S = \int_{\mu_{Net} > 0}^{+\infty} h\left(\mu_{Net} \middle| Gross_1 ; BkG_1 ; I\right) d\mu_{Net}$. Cette intégrale correspond à la probabilité $P\left(\overline{H_0}\right)$ que l'échantillon soit radioactif, toutes valeurs possibles confondues (*Vivier, Le Petit 2009*). On en déduit que la surface manquante $1 - S$ est la probabilité de l'évènement complémentaire $P\left(H_0\right)$ que l'échantillon soit non radioactif !

$$P\left(H_0 \middle| Net; I\right) = P\left(H_0\right) = 1 - P\left(\overline{H_0}\right) = 1 - \int_{\mu_{Net} > 0}^{+\infty} h\left(\mu_{Net} \middle| Gross_1 ; BkG_1 ; I\right) d\mu_{Net} \quad \textbf{(12)}$$

Cette probabilité, représentée par un pic de Dirac sur la valeur $\mu_{Net} = 0$, correspond à une normalisation additive. La loi *a posteriori* normalisée s'écrit :

$$h_{norm}\left(\mu_{Net} \middle| Gross_1 ; BkG_1 ; I\right) = P\left(H_0\right) \partial\left(0\right) + h\left(\mu_{Net} \middle| Gross_1 ; BkG_1 ; I\right) \quad \textbf{(13)}$$



Graphe 8 : évolution de $P(H_0)$ ***en fonction de la mesure nette***

On note que *:*

1. Pour les comptages nets inférieurs au seuil de décision, $P(H_0)$ est supérieur au risque α :

$$P\left(H_0 \middle| Net < LC(Net)\right) > \alpha \quad \textbf{(14a)}$$

2. Pour les comptages nets supérieurs au seuil de décision, $P(H_0)$ est inférieure au risque α :

$$P\left(H_0 \middle| Net > LC(Net)\right) < \alpha \quad \textbf{(14b)}$$

Ce résultat (14b) justifie l'usage courant selon lequel l'effet est déclarée « détecté » lorsque la valeur de mesure est supérieure au seuil de décision, la probabilité que l'échantillon ne contienne aucune radioactivité étant alors négligeable. Elle devient supérieure à 50 % lorsque $Net < 0$. L'expression *a posteriori* **(14b)** et le risque α *a priori* **(3)** qui s'écrit $P\left(Net > LC(Net) \middle| H_0\right) = \alpha$ sont en inversion bayesienne et ne doivent pas être confondues.

3.5.3 CALCUL PRATIQUE DES ESTIMATEURS BAYESIENS ET DES INTERVALLES DE CONFIANCE

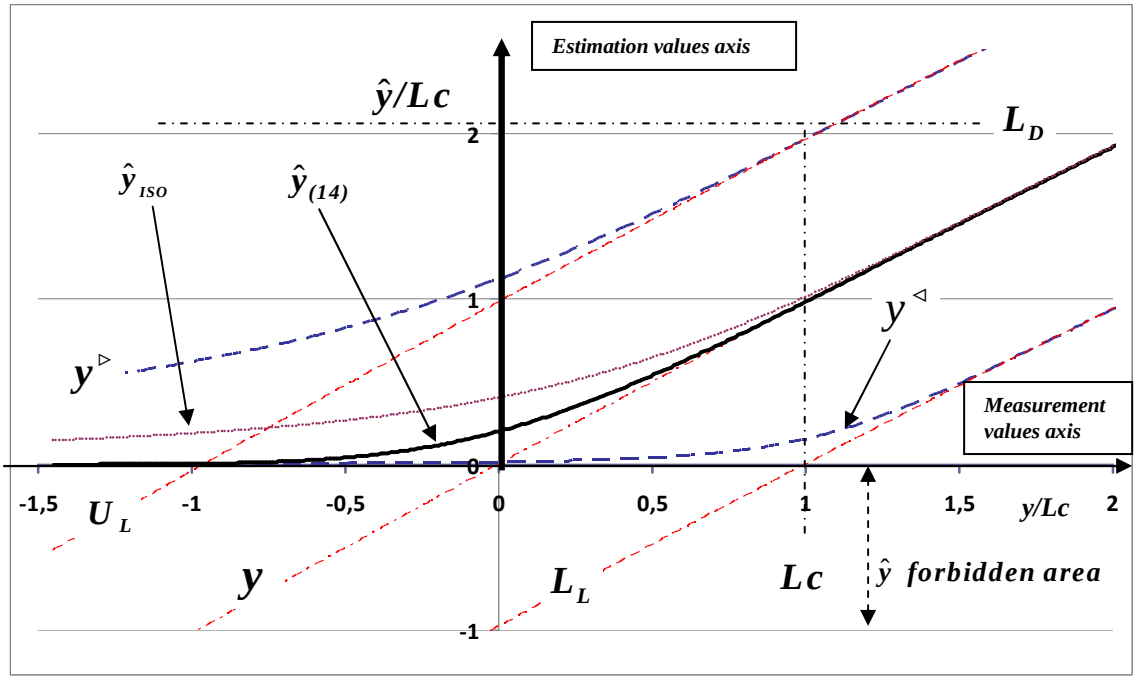
Le produit de convolution **(11)** peut se modéliser par une loi normale prenant ses valeurs dans $\mathbb{R}^+$, de paramètres $\mu = Net_{est}$ et $\sigma = \sqrt{Brut_1 + BkG_1}$, estimateurs classiques du mesurande et de son incertitude au sens du GUM (*Vivier Aupiais 2007*). Cette approximation reste valable lorsque $Net_{est} < L_C$, voire $Net_{est} < 0$. Cette gaussienne tronquée est une approximation de la loi a posteriori, obtenue pour l'essentiel à partir de l'hypothèse poissonienne.

On note $\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x} exp\left(-\frac{v^2}{2}\right) dv$ la fonction de répartition de la loi gaussienne centrée réduite. Soit une mesure y et son incertitude $u(y)$ classique, on peut à partir de cette approximation gaussienne, calculer :

- La probabilité d'être non radioactif : $P(H_0) = \Phi\left(\frac{y}{u(y)}\right)$ **(15)**

En notant $\hat{y}_{ISO}$ l'estimation ponctuelle bayesienne et $u^2_{ISO}(\hat{y})$ son incertitude associée selon la norme ISO 11929-2010 (*eq. 35 et 36*), les estimateurs bayesiens tenant compte de $P(H_0)$ deviennent :

- Estimateur bayesien ponctuel $\hat{y} = \hat{y}_{ISO} \times P\left(\overline{H_0}\right)$ **(16)**
- Evaluation bayesienne de l'incertitude associée $u(\hat{y}) = \sqrt{u_{ISO}^2(\hat{y})P\left(\overline{H_0}\right) + \hat{y}^2 P\left(H_0\right)}$ **(17)**
- Limite basse $y^{\triangleleft}$ de l'intervalle de confiance ou *lower limit* $\left(L_L\right)$: idem ISO 11929 (eq 29)
- Limite haute $y^{\triangleright}$ de l'intervalle de confiance ou *upper limit* $\left(U_L\right)$: idem ISO 11929 (eq 30)



Graphe 9 : évolution des estimateurs bayesiens et classiques en fonction de la valeur de mesure par rapport au seuil de décision

La méthode de calcul des estimateurs bayesiens $\hat{y}$, $y^{\triangleleft}$ et $y^{\triangleright}$ est indépendante de la position de la mesure par rapport au seuil de décision. Toutefois, pour des mesures nettes supérieures au seuil de décision $\left(y > L_c\right)$, les estimateurs bayesiens convergent vers les estimateurs classiques :

- $\hat{y} \approx \hat{y}_{ISO} \approx y$
- $u(\hat{y}) \approx u_{ISO}^2(\hat{y}) \approx u(y)$
- $y^{\triangleright} \approx y + k_{1-\gamma/2} u(y) = U_L$
- $y^{\triangleleft} \approx y - k_{1-\gamma/2} u(y) = L_L$

L'approche bayesienne formelle n'est donc guère utile pour des mesures nettes supérieures au seuil de décision.Pour des mesures nettes proches puis inférieures au seuil de décision :

Limite basse $y^{\triangleleft}$: la borne basse classique $y^{\triangleleft}{}_{class.} = y - 2u(y)$ devient négative au passage du seuil de décision. La limite basse bayesienne $y^{\triangleleft}$ ne présente pas ce défaut mais tend rapidement vers zéro, perdant alors de son intérêt. La probabilité $P\left(H_0\right)$ devenant significative, il est plus pertinent d'intégrer la valeur vraie $\tilde{y} = 0$ à l'intervalle de confiance en prenant $y^{\triangleleft} = 0$ lorsque $y < Lc$.

Estimateur ponctuel moyen : sous le seuil de décision, l'estimateur ponctuel moyen $\hat{y}$ ***(16)*** diverge significativement de la valeur de mesure y. Lorsque $y < L_c$, l'incertitude relative $\hat{y}/u(\hat{y})$ devient supérieure à 100 % et l'estimation ponctuelle $\hat{y}$ perd son intérêt au profit de la limite haute $y^{\triangleright}$ plus pertinente.

Limite haute $y^{\triangleright}$: Au niveau du seuil de décision, la limite haute bayesienne $y^{\triangleright}$ n'est guère différente de la limite haute classique $y^{\triangleright}{}_{class.} = y + 2u(y)$. Des différences significatives apparaissent au voisinage de $y = 0$. La limite haute classique devient négative lorsque la valeur de mesure est inférieure à $-L_c$. Quelle que soit la valeur de mesure y , on peut écrire $\tilde{y} < y^{\triangleright}$ avec un niveau de confiance P donné.

Niveau de confiance : pour des mesures nettes inférieures au seuil de décision $y < L_C$, avec $y^{\triangleleft} = 0$, il faut alors intégrer la surface du pic de Dirac au niveau de confiance de l'intervalle $\left[0\,;y^{\triangleright}\right]$. On obtient :

$$P\left(\tilde{y} \in \left[0\,;y^{\triangleright}\right]\right) = P\left(\tilde{y} < y^{\triangleright}\right) = P\left(H_0\right) + P\left(\overline{H_0}\right)\left(1-\gamma/2\right) = 1 - P\left(\overline{H_0}\right)\gamma/2 \quad \textbf{(18)}$$

3.5.4 INTÉRÊT PARTICULIER DE LA LIMITE HAUTE *A POSTERIORI* $y^{\triangleright}$ POUR LES MESURES À BAS NIVEAU

Usuellement considérée comme « non significative », une mesure inférieure au seuil de décision possède un contenu informationnel : l'activité vraie contenue dans l'échantillon est selon toute vraisemblance inférieure à la limite haute $y^{\triangleright}$ elle même inférieure à la limite de détection L_D (*graphe 9*) :

$$y < L_c \quad \Rightarrow \quad 0 \le \tilde{y} < y^{\triangleright} < L_D \quad \textbf{(19)}$$

L'inégalité $\tilde{y} < y^{\triangleright}$ représente le concept de limite haute *a posteriori.* La probabilité que la valeur vraie soit supérieure à $y^{\triangleright}$ peut être calculée à partir de la relation **(18).**

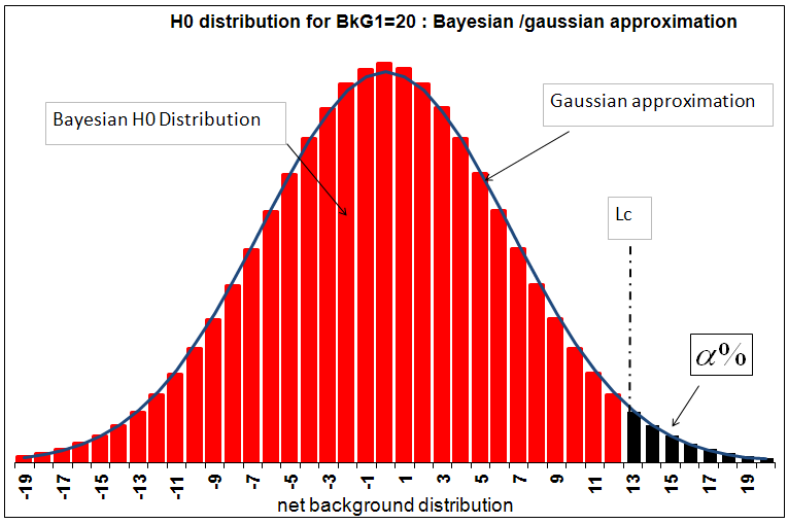
$$P(\tilde{y} > y^{\triangleright}) = 1 - P(\tilde{y} < y^{\triangleright}) = P\left(\overline{H_0}\right)\gamma/2 \quad \textbf{(20)}$$

La relation **(19)** permet d'affirmer *a priori* que pour toute mesure inférieure au seuil de décision, on aura *a minima* $\tilde{y} < L_D$. Dans son article fondateur, Currie attirait déjà l'attention sur le rôle respectif de ces deux limites hautes, et sur l'importance de ne pas les confondre : *« A second possible mistake is the confusion of an a posteriori upper limit with the a priori detection limit »* (*Currie 1968, p588*).

3.6 DEMARCHE USUELLE :CONSTRUCTION DU SEUIL DE DÉCISION SUR UNE STATISTIQUE NETTE

L'hypothèse H_0 se construit comme la différence de deux variables de bruit de fond *iid* déterminées à partir d'une mesure unique de bruit de fond BkG_1 . Le théorème de Bayes appliqué dans le sens inverse puis dans le sens direct (*graphes 5 et 7*) permet d'obtenir la distribution de H_0 prenant ses valeurs dans l'espace des mesures. Cette loi, de paramètre unique $\boldsymbol{BkG_1}$ s'écrit comme une somme discrète (*Vivier, Aupiais 2007*) :

$$P\left(BkG_{Net} \mid \boldsymbol{BkG_1}; H_0; I\right) = \sum_{BkG \ge -BkG_{Net}} \frac{1}{3^{2\,BkG + BkG_{Net} + \boldsymbol{BkG_1} + 1}} \times \frac{\left(2BkG + BkG_{Net} + \boldsymbol{BkG_1}\right)!}{BkG!\left(BkG + BkG_{Net}\right)!\boldsymbol{BkG_1}!} \quad \textbf{(21)}$$



Graphe 10 : distribution (19) de l'hypothèse H_0 pour BkG=20

La distribution de H_0, centrée sur $Net = 0$ s'étend naturellement sur la partie négative Ceci n'est pas contradictoire avec la condition $\mu_{Net} \geq 0$: la mesure d'un échantillon non-radioactif génère en moyenne 1 fois sur 2 une valeur nette négative. La loi de probabilité **(21)** est très bien approximée par une loi gaussienne discrétisée $\mathcal{N}\left(\mu_{H_0} = 0, \sigma_{H_0} = \sqrt{2\left(\boldsymbol{BkG_1} + 1\right)}\right)$.

Pour des temps de comptage du bruit de fond et de l'échantillon égaux, on obtient :

$$\hat{L}c(Net) = k_{1-\alpha}\hat{\sigma}_{H_0} = k_{1-\alpha}\sqrt{2\hat{\sigma}^2_{BkG}} = k_{1-\alpha}\sqrt{2\left(\boldsymbol{BkG_1} + 1\right)} \quad \textbf{(22a)}$$

Ce seuil de décision est très proche du seuil classique $\hat{L}c(Net) = k_{1-\alpha}\sqrt{2BkG}$ (*Currie 1968*).
Le terme $''+1''$ dans la relation **(22a)** est la signature de l'approche bayesienne.

Pour des temps de comptage inégaux la relation devient (Vivier, Aupiais 2007) :

$$\hat{L}c(Net) = k_{1-\alpha}\sqrt{\left(1 + 1/n\right)\left(\boldsymbol{BkG_1}\left(t_0\right) + 1\right)/n} \quad \textbf{(22b)}$$

Avec

$n = t_0/t_s$

t_0 temps de comptage du bruit de fond

t_s temps de comptage de l'échantillon.

3.7 INCERTITUDE ASSOCIÉE À L'ÉVALUATION DU SEUIL DE DÉCISION

En utilisant la propriété $u\left(\hat{\sigma}\right) \approx 0.5$ (cf §3.4.2), l'incertitude associée à l'estimation du seuil de décision, homogène à un écart-type, est :

$$u\left(\hat{L}c(Net)\right) = 0{,}5\, k_{1-\alpha}\sqrt{2} = k_{1-\alpha}/\sqrt{2} \quad \textbf{(23a)}$$

Pour un risque $\alpha = 2{,}5\%$ et un niveau de confiance à 95 %, on obtient une incertitude élargie constante : $U\left(\hat{L}c(Net)\right) \approx 2{,}8$. Pour une valeur de mesure dans l'intervalle $\left[\hat{L}c - 2{,}8; \hat{L}c + 2{,}8\right]$, la situation est indécidable. Il convient alors de prolonger le comptage..

En cas de temps de comptage inégaux, l'incertitude associée au seuil de décision (22b) devient :

$$u\left(\hat{L}c(Net)\right) = k_{1-\alpha}/\sqrt{2n} \qquad \textbf{(23b)}$$

3.8 COHÉRENCE DES SEUILS DE DÉCISION ENTRE STATISTIQUE BRUTE ET STATISTIQUE NETTE

La cohérence entre seuils de décision brut et net se traduit par l'équivalence $Net > \hat{L}c(Net) \Leftrightarrow Gross > BkG + \hat{L}c(Net)$. On en déduit que ces deux seuils doivent respecter la relation $\hat{L}c(Gross) \approx \hat{L}c(Net) + BkG$. Avec $\hat{L}c(Net) = k_{1-\alpha}\sqrt{2\left(BkG_1 + 1\right)}$, on obtient effectivement $Lc(Gross) \approx BkG_1 + 1 + k_{1-\alpha}\sqrt{2\left(BkG_1 + 1\right)}$, où l'on retrouve la relation **(10).**

Exemple numérique : $BkG_1 = 20 \Rightarrow \hat{L}c(Gross) = 34$ (*graphe 7*) et $\hat{L}c(Net) = k_{1-\alpha}\sqrt{2\left(20+1\right)} = 13$ (*graphe 10*)

3.9 DÉTERMINATION DE LA LIMITE DE DÉTECTION. IMPACT DE L'INCERTITUDE SUR LE RENDEMENT

La limite de détection L_D est la moyenne vraie de hypothèse alternative H_1 telle que la probabilité *a priori* d'obtenir une valeur de mesure inférieure au seuil de décision soit égale à une valeur donnée β , appelé risque de seconde espèce.

$$P\left(Net < L_C(Net) \middle| BkG_1; H_1; I\right) \leq \beta \quad \textbf{(24)}$$

La relation (24) traduit le fait que la limite de détection est la valeur respectant la relation :

$$LD_{Net} = k_{1-\alpha}\sigma_{H_0} + k_{1-\beta}\sigma_{H_1} \quad \textbf{(25)}$$

L'augmentation de l'incertitude relative sur le rendement élargie la distribution H_1 suivant la relation :

$$\sigma_{H_1} = \sqrt{L_D + \left(\frac{u_\varepsilon}{\varepsilon} L_D\right)^2 + 2\left(BkG_1 + 1\right)} \quad \textbf{(26)}$$

a) incertitude relative sur le rendement inférieure à 10 % :

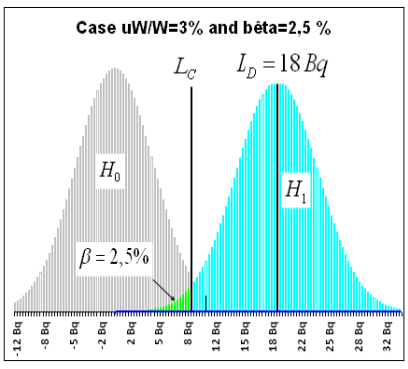
Lorsque l'incertitude relative sur le rendement $u_\varepsilon / \varepsilon$ reste inférieure à 10 %, la relation (26) se simplifie avec $\sigma_{H_1} \approx \sqrt{L_D + 2\left(BkG_1 + 1\right)}$ et la distribution de l'hypothèse H_1 peut être approximée par la loi gaussienne discrétisée $\mathcal{N}\left(\mu_{H_1} = L_D, \sigma_{H_1}\right)$. Pour un risque β égal au risque α , la limite de détection s'obtient en résolvant l'équation (26) (*graphe 11 a*) :

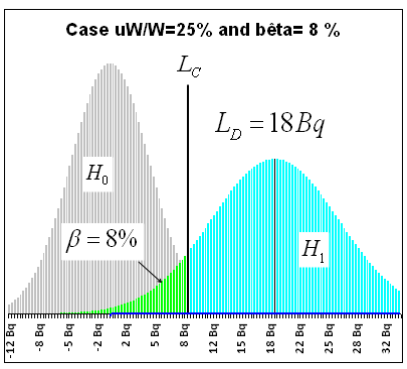
$$L_{D\,Net} = k_{1-\beta}^2 + 2L_C \quad \textbf{(27)}$$

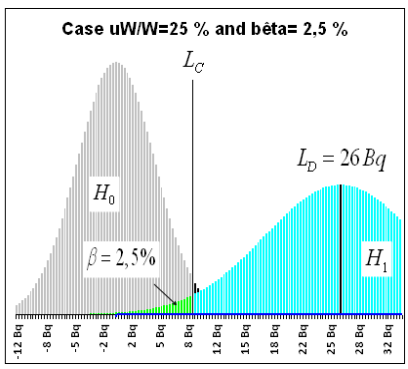
b) incertitude relative sur le rendement comprise entre 10 % et 30 % :

Dans ce domaine d'incertitude, l'approximation gaussienne de H_1 est encore recevable mais la relation (26) ne peut plus se simplifier. Pour une limite de détection inchangée, l'élargissement de la distribution de H_1 génère un risque β plus élevé(*graphe 11b)*. Pour retrouver le risque β initial, il faut augmenter la limite de détection et par conséquent la valeur de σ_{H_1} (*cf graphe 11c*). La résolution de l'équation (25), compte–tenu de la relation (26) donne :

$$L_D = y^{\#} = \frac{k_{1-\beta}^2 + 2L_C}{1 - \left(u_\varepsilon / \varepsilon\right)^2 k_{1-\beta}^2} \quad \textbf{(28)}$$







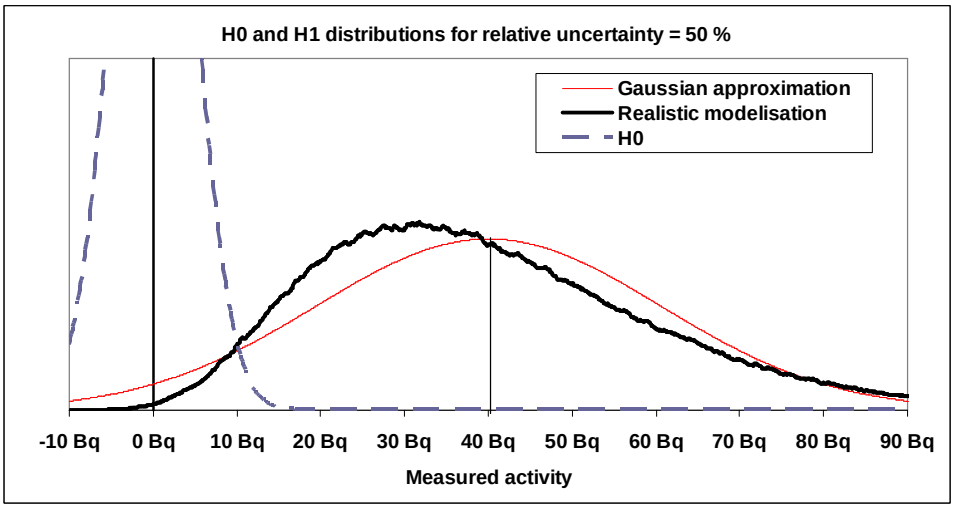
(a) **(b)** **(c)**

Graphe 11 : effet de l'incertitude associée au facteur de conversion sur la limite de détection

c) incertitude relative sur le rendement supérieure à 30 %

Pour de telles incertitudes relatives, l'approximation gaussienne qui conditionne la valeur de $k_{1-\beta}$ génère des effets inacceptables. En effet, la relation (28) montre que lorsque l'incertitude relative tend vers $1/k_{1-\beta}$, (*resp 51 % pour* $\beta = 2,5\%$ *et 61 % pour* $\beta = 5\%$), la limite de détection tend rapidement vers $+\infty$, et devient négative pour des valeurs supérieures.

Cet effet ne correspond à aucune réalité physique, et provient d'une mauvaise estimation du fractile $k_{1-\beta}$. L'abandon de l'approximation gaussienne et l'utilisation d'une modélisation plus réaliste du rendement par des lois bêta permet d'éviter cet effet.



Graphe 12 : Modélisation réaliste de la distribution H1 (40Bq) vs approximation gaussienne

Dans cet exemple, on obtient, pour une même limite de détection $L_{D\mathcal{A}} = 40Bq$ (*cf §4*).

- Avec une modélisation réaliste : $\beta = 2,5\%$, correspondant à un fractile $k^*_{1-\beta} = 1,5$
- Avec l'approximation gaussienne : $\beta = 6,5\%$, correspondant à un fractile $k_{1-\beta} = 1,96$

Pour obtenir un risque $\beta = 2,5\%$ dans l'approximation gaussienne, la relation (28) donne une limite de détection $L_{D\mathcal{A}} = 4596\,Bq$, soit une valeur 100 fois trop élevée.

La solution consiste à utiliser dans la relation (28) un fractile effectif $k^*_{1-\beta}$ adapté à une modélisation réaliste :

$$L_D = y^{\#} = \frac{k^2_{1-\beta} + 2L_C}{1-\left(u_\varepsilon/\varepsilon\right)^2 k^{*2}_{1-\beta}} \quad (29)$$

Cette formule est adaptée au trois cas précités.

4 UTILISATION DU SEUIL DE DÉCISION ET DE LA LIMITE DE DÉTECTION

4.1 UTILISATION *A PRIORI* : MAITRISE FREQUENTISTE DES RISQUES α ET β

Un seuil de décision déterminé pour un risque $\alpha = 2,5\%$ permet de prévoir que la mesure de 1000 échantillons non-radioactifs débouchera en moyenne à 975 non–détections justifiées, et à 25 détections à tord (*faux positifs*).
Un risque $\beta = 2,5\%$ permet de prévoir que sur 1000 échantillons contenant une activité égale à la limite de détection, en moyenne 25 seront « non-détectés » (*faux négatifs*).

4.2 UTILISATION *A POSTERIORI* : TEST D'HYPOTHÈSE ET DÉCISION

Cette utilisation des seuils de décision et limites de détection est conforme à la définition des tests d'hypothèses fondée sur des rapports de vraisemblance (*théorème de Neyman et Pearson*). Soit un échantillon mesuré avec une valeur Net_1 donnée. On peut calculer la vraisemblance $P\left(Net_1 \middle| H_0\right)$ de cette valeur sous l'hypothèse H_0 et $P\left(Net_1 \middle| H_1\right)$ sous l'hypothèse H_1. Deux cas sont possibles :

Cas 1 : $Net_1 > L_C \Rightarrow P\left(Net_1 \middle| H_1\right) > P\left(Net_1 \middle| H_0\right)$; la vraisemblance de l'hypothèse H_1 est plus élevée que la vraisemblance de l'hypothèse H_0. On décide, « *selon toute vraisemblance* », de rejeter l'hypothèse H_0, au risque α près, en déclarant « *effet détecté* », sous-entendant une très forte probabilité de présence de radioactivité. La valeur de $P\left(H_0\right) < \alpha$ confirme cette décision (cf 14a)

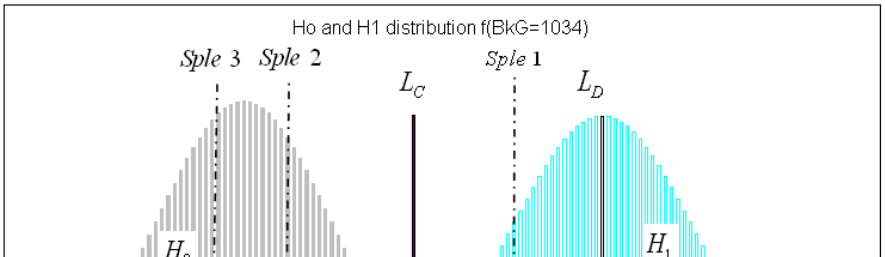
Cas 2 : $Net_1 < L_C \Rightarrow P\left(Net_1 \middle| H_0\right) > P\left(Net_1 \middle| H_1\right)$; la vraisemblance de l'hypothèse H_0 est plus élevée que la vraisemblance de l'hypothèse H_1. On décide, « *selon toute vraisemblance* », de rejeter l'hypothèse H_1 au risque β près, en déclarant « *mesure non significative* ». Le rejet de H_1 permet d'écrire $\tilde{y} < L_D$. Le non-rejet de l'hypothèse H_0 se traduit par une probabilité non négligeable que l'échantillon soit non radioactif, ce que confirme la relation $P\left(H_0\right) > \alpha$ (cf 14 b).

4.3 APPLICATION NUMERIQUE

On mesure trois échantillons susceptibles de contenir un radionucléide spécifié, par comptage nucléaire d'une durée $T = 100\,s$ avec un rendement $\varepsilon = 10\,\%$ d'incertitude négligeable. On obtient les valeurs de comptages suivantes :

	Echantillon 1	**Echantillon 2**	**Echantillon 3**
Comptage de bruit de fond	$BkG_1 = 995$	$BkG_2 = 1034$	$BkG_3 = 1015$
Comptage brut	$Gross_1 = 1139$	$Gross_2 = 1056$	$Gross_3 = 990$
Net estimé	$Net_1 = 144$	$Net_2 = 22$	$Net_3 = -25$

Tableau 2 : valeurs de comptages échantillons 1 à 3



Graphe 13 : mesures échantillons versus seuil de décision et limite de détection

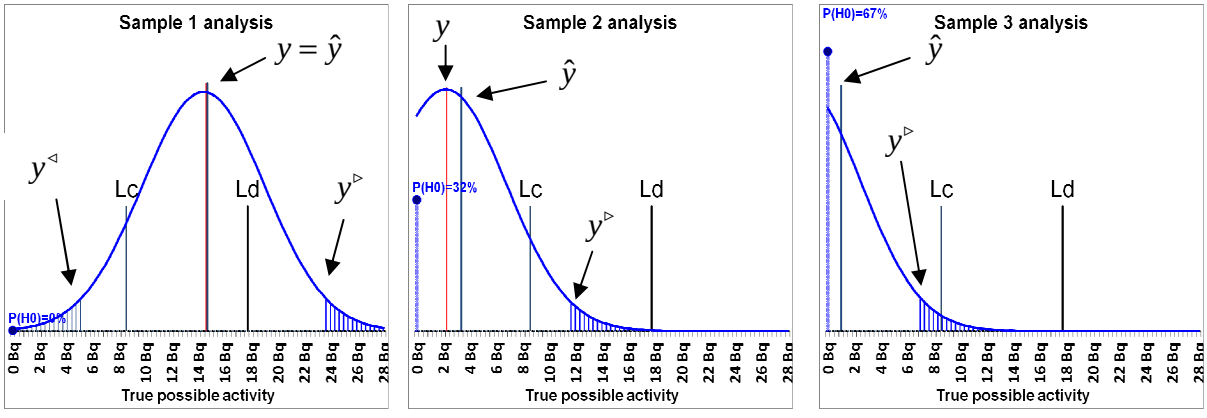
On peut convertir ces valeurs de comptages nets en activité selon le modèle fondamental de la mesure nucléaire :

$$\mathcal{A} = \frac{(Gross - BkG)}{\varepsilon T} = \frac{Net}{\varepsilon T} \quad \textbf{(30)}$$

Cette modélisation introduit un facteur de conversion multiplicatif $W = 1/\varepsilon T$ qui conserve l'allure générale des lois de probabilités obtenues précédemment. La méthode proposée dans cet article permet d'obtenir les informations suivantes :

	Echantillon 1	Echantillon 2	Echantillon 3
$L_C(\alpha = 2{,}5\%)$ (rel 22)	*8,7 Bq*	*8,9 Bq*	*8,8 Bq*
$L_D(\beta = 2{,}5\%)$ (rel 26)	*17,8 Bq*	*18,2 Bq*	*18,0 Bq*
Activité mesurée $\mathcal{A}$ (rel 27)	*14,4 Bq*	*2,2 Bq*	*-2,5 Bq*
Incertitude GUM $u(\mathcal{A})$	*4,6 Bq*	*4,6 Bq*	*4,5 Bq*
1)Estimateur ponctuel bayesien $\hat{\mathcal{A}}$ (rel 16)	14,4 Bq	3,1 Bq	0.8 Bq
2) Incertitude bayesienne $u(\hat{\mathcal{A}})$ (rel 17)	4,6 Bq	3,9 Bq	2,3 Bq
3) $\left[y^{\triangleleft}; y^{\triangleright} \right]$ (ISO 11929)	$[5\,Bq; 24\,Bq]$	$[0\,Bq; 12\,Bq]$	$[0\,Bq; 8{,}6\,Bq]$
4) $P(H_0)$ (rel 15)	0,09%	32%	71 %

Tableau 3 : résultats d'analyse échantillons 1 à 3



(a) **(b)** **(c)**

Graphe 14 : loi a posteriori de la valeur vraie pour les échantillons 1 à 3

Echantillon 1 (*graphe 14a***)**.: Mesure supérieure au seuil de décision On note l'absence de différence entre les estimateurs classiques et bayésiens : La probabilité $P(H_0)$ est négligeable, confirmant un effet détecté. La loi de probabilité *a posteriori* ainsi que l'intervalle de confiance sont symétriques, ce qui correspond à l'approche usuelle du GUM.

Echantillon 2*(graphe 14b)*. *:* Mesure positive mais inférieure au seuil de décision La loi *a posteriori* n'est plus symétrique et présente l'aspect d'une gaussienne centrée sur la valeur de mesure puis tronquée à l'origine. L'estimateur bayesien $\hat{\mathcal{A}}$ diffère de l'estimateur classique $\mathcal{A}$. La probabilité $P(H_0) = 32\,\%$ n'est plus négligeable. La limite haute $y^{\triangleright}$ est inférieure à la limite de détection L_D. On dispose des informations suivantes :

- Mesure non significative
- 32 % de chance d'être non radioactif
- $\tilde{\mathcal{A}} < 11\,Bq$ au niveau de confiance $1 - P\left(\overline{H_0}\right)\gamma/2 = 98\%$

Echantillon 3 *(graphe 14 c)*: Mesure négative sans sens physique. Seule l'estimation bayesienne $\hat{\mathcal{A}} = 2{,}3\,Bq$ a un sens. La probabilité d'être non-radioactif est très élevée : $P(H_0) = 67\,\%$. L'aspect de gaussienne tronquée de la loi *a posteriori* est encore plus marqué.. Fait remarquable, la limite haute $y^{\triangleright} = 8{,}6\,Bq$ est maintenant inférieure au seuil de décision L_C. On dispose des informations suivantes :

- *Mesure non significative*
- *71 % de chance d'être non-radioactif*
- $\tilde{\mathcal{A}} < 8{,}6\ Bq$ *au niveau de confiance* $1 - P\left(\overline{H_0}\right)\gamma/2 = 99\%$

D'un échantillon à l'autre, la valeur du seuil de décision fluctue en raison des fluctuations du bruit de fond mesuré. Le seuil de décision associé à une mesure unique possède une incertitude vaut ici 0,26 Bq **(23)**.

5 CONCLUSION

La dialectique cause–effet permet de donner un sens fondamentalement distinct d'une part au concept fréquentiste du seuil de décision associé à un risque de première espèce et d'autre part au concept bayesien de l'incertitude associée à une mesure.

L'approche proposée dans cet article permet d'obtenir des informations quantitatives pertinentes à partir d'une seule mesure nette, même pour des mesures inférieures au seuil de décision :

- La probabilité $P\left(H_0\right)$ que l'échantillon soit non-radioactif
- La limite haute $y \triangleright$, toujours inférieure à la limite de détection lorsque la mesure est inférieure au seuil de décision.

Ces deux informations permettent de répondre aux problèmes énoncés en introduction :

- L'intervalle de confiance $[-11\ Bq\ ,7\ Bq]$ obtenu par approche classique (échantillon 3 du §4) devient $[0\ Bq\ ,8{,}6\ Bq]$. La probabilité que la radioactivité éventuellement contenue dans cet échantillon dépasse $8{,}6\ Bq$ n'est que de 1%, quand bien même la limite de détection *a priori* vaut $18\,Bq$.
- La probabilité que l'échantillon soit non radioactif est élevée, de l'ordre de 71 %.

Pour des mesures supérieures au seuil de décision, les résultats obtenus avec l'approche proposée ici restent parfaitement cohérents avec l'approche classique (GUM).

RÉFÉRENCES

ISO 11929:2010: Determination of characteristic for measurements of ionizing radiation|Fundamentals and applications. Geneva, ISO, 2010

BIPM JCGM 100:2008: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM), BIPM, 2008;

Currie LA. : *Limits for qualitative detection and quantitative determination*. Anal Chem **40**:586-592, 1968

Gregory P.*, Bayesian Logical Data Analysis for the Physical Sciences*. Cambridge, U.K.: Cambridge Univ. Press, 2003**.**

Saporta G. : *Probabilités, analyse des données et statistiques*, Ed Technip, Paris, 1990

Vivier A, Aupiais J *Optimization of the decision threshold for single radioactive counting*. Radiochim Acta **95**:477-492, 2007

Vivier, A.; Le Petit, G.; Pigeon, B.; Blanchard, X.: *Probabilistic assessment for a sample to be radioactive or not: application to radioxenon analysis*. J. Radioanal. Nucl. Chem., **282**, 743-748, 2009

Vivier A. ; Manificat G;, Picolo J-L., Fleury;S., Mokili M., Guo X. Decision *threshold associated with multiple measurements. Application to the synthesis of the environment monitoring results*. Radioprotection,**47**, 51-77, 2012

Kirkpatrick JM ; Young BM. : *Poisson Statistical Methods for the Analysis of Low-Count Gamma* Spectra. IEEE transactions on nuclear science, **56**, 1278-1282, 2009

Kirkpatrick, J.M.; Venkataraman, R.; Young, B.M.: Minimum detectable activity, systematic uncertainties, and the ISO 11929 standard. J. Radioanal. Nucl. Chem.,6 pages, published online: 26 Aug. 2012

Miller G.; Martz H.; Little T., Bertelli L. *Bayesian hypothesis testing- use in interpretation of measurements.helth* Physics **94**, 248-254, 2008

Rivals I. C. Fabbri C., Euvrard G., Blanchard X. : A Bayesian method with empirically fitted priors for the evaluation of environmental radioactivity: application to low-level radioxenon measurements" J Radioanal Nucl Chem **292**:141–153, 2012