计算机解谱研究

庞 巨 丰*

(陕西省预防医学研究所核保健物理研究室)

摘要: 作者应用电子计算机进行γ能谱定量解析方法的研究,已有近20年的历史,全面介绍无此必要。本文只简单地叙述近些年来应用计算机解谱的研究工作,主要是Ge(Li)γ谱峰自动分析方法的研究。

一、前 言

作者从1972年开始就应用电子计算机研究γ能谱的定量解析方法。最初,研究NaI(T1)γ谱的定量解析方法,是在延安701型(仿X-2)计算机上,采用BASIC语言设计程序。主要是用逆矩阵法解谱,并在此研究的基础上提出了新的解谱方法:最小二乘——逆矩阵法[1]。七十年代中期,随着DJS系列机的出现,又在DJS-14机上,采用简化ALGOL语言设计计算机程序,继续研究NaI(T1)γ谱的定量解析方法。主要是逐道最小二乘法(通称最小二乘法),在此研究的基础上,又提出了"复合道区最小二乘法"的新的解谱方法[2]。同时,又研究了比较分立的简单的NaI(T1)γ谱峰的分析方法,即全能峰拟合的峰面积计算方法。曾采用高斯函数、改型双曲正割函数等[3],描述了γ全能峰的数学模型,从而解决了各种不同放射性混合的NaI(T1)γ谱和核爆炸碎片NaI(T1)γ谱的定量解析问题。八十年代开始,作者主要是采用PDP-11机研究Ge(Li)或HPGeγ谱峰的自动分析方法。

二、Ge(Li)γ谱峰自动分析方法

应用电子计算机自动分析Ge(Li)(或其它Ge探测器)γ谱峰,一般包括:谱数据光滑、自动找峰、确定待分析的峰组(单峰是峰组的特殊形式)区间、基线拟合(也可以不作此步)以及用分析函数加基线作为拟合函数进行非线性最小二乘法拟合求峰面积。作者对各个环节都进行了较全面的研究,在峰面积计算中,没有用复杂函数拟合和简单累加计数或单纯平均累加计数峰面积法[4,5]。提出并研究了一种较简单而又比较准确的Ge(Li)γ谱峰自动分析方法。

1. 用离散函数褶积滑动变换法作谱数据光滑[6]

γ谱的数据光滑常用的方法主要有三点(或五点)平均法、重心法、多项式最小二乘拟合法、付里叶变换法以及离散函数褶积滑动变换法。实际上,三点平均法、重心法和多项式最小二乘拟合法都可以表示为离散函数褶积滑动变换的形式,不同的只是变换函数为特定的多项式罢了。付里叶变换法与函数褶积变换法本质上是一样的,类似于通讯理论中的"滤波"方法。它们之间不同之处是:前者为"频域滤波",后者为"时域滤波"。可见,用离散函数褶积滑动变换法作谱数据光滑具有普遍的意义。

离散函数褶积滑动变换法,实质上相当于通讯理论中的"时域滤波"。但在Ge(Li)γ谱数据光滑中,并非"时域"而是"能域"(用"道"表示)。

在"时域"滤波中,滤去了噪声的净信号是滤波函数与测量信号的褶积:

$$Z(t)=\int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)x(t-\tau)d\tau$$

*作者已调到西安石油学院

对于离散取样，取样数目总是有限的，“时域”数字滤波为有限数目褶积求和的形式：

$$Z(i\Delta t)=\sum_{k=-m}^{m} f(k\Delta t)x[(i-k)\Delta t] \quad ①$$

其中：Δt 为时间轴上等分的时间间隔，$2m+1$ 为取样数目。

有限取样数目褶积求和滤波的方法应用于γ谱的数据光滑时，就是在“能域”上的褶积求和。用“道”表示时，道间隔为1，因此，第i道光滑后的数据$\overline{y}(i)$可表示为：

$$\overline{y}(i)=\sum_{k=-m}^{m} f(k)y(i+k) \quad ②$$

其中：$y(i+k)$为原始观测数据，$W=2m+1$为选用的数据点数，$f(k)$为变换函数（即滤波函数），它是以离散数值的形式出现，也称变换系数，它必须满足下面的条件：

$$\begin{cases} \sum_{k=-m}^{m} f(k)=1 \\ f(k)=f(-k) \end{cases} \quad ③$$

用褶积滑动变换的方法进行数据光滑，关键的问题是变换函数$f(k)$的选择。在实际应用中，变换函数$f(k)$通常是一个“窗函数”。当$|k|>m$时，$f(k)=0$，即$|k|=m$为切断点。

2. 自动找峰[7]

在Ge(Li)γ谱分析中，确定峰位置—找峰，是十分重要的环节。通常，用肉眼目视法找峰比较容易，但在计算机上自动找峰就不那么简单了。一种好的找峰方法要求：对重峰的分辨能力强；弱峰漏识和假峰误认的几率低；高基底（或缓慢变化的强本底）上的弱峰识别能力强。根据这些要求，作者对几种主要的找峰方法进行了研究和比较。

（1）高斯乘积函数法找峰

这是一种利用半宽度参数找峰的方法。描述Ge(Li)γ谱峰形状的函数，主要部分是高斯函数：

$$G(i)=y_0 exp[-4ln2\frac{(i-i_0)^2}{H^2}] \quad ④$$

由相邻的4道数据定义一个新的函数：

$$P_1(i)=\frac{G(i)G(i-1)}{G(i-2)G(i+1)} \quad ⑤$$

显然：$P_1(i)=\exp(11.092/H^2)$

只与H有关，称为第一高斯乘积函数。虽然，$P_1(i)$形式上与i无关，但半宽度H不是一个独立变量，它与峰的位置有关。因此，用下面的判据：

$$P_1(i)=\begin{cases} 1 & \text{当无}\gamma\text{峰，即}H\to\infty\text{时} \\ C>1 & \text{当有}\gamma\text{峰，即}H\text{为有限值时} \end{cases} \quad ⑥$$

则可以判断峰的存在。

（2）一、二、三阶数值微商法找峰

一个连续函数$f(x)$，如果它是可微的，则极值存在的必要条件是$f'(x_0)=0$，$f'(x)$随x渐增过x_0从正变负时，$f(x_0)$为极大值。极值存在的充分条件是$f''(x_0)\neq0$，$f''(x_0)<0$时，$f(x_0)$为极大值。于极值处$f'''(x_0)=0$，当x渐增通过x_0，$f'''(x)$由负变正时，$f(x_0)$为极大值。

由于γ谱为离散数据，将这种数学原理用于寻找γ峰时，要用数值微商，故称为一、二、三阶数值微商找峰法。Savitzky等[8]人已给出了一般的多项式光滑数值微商公式：

$$y_i^s=\frac{1}{N_s}\sum_{j=-m}^{m} C_j y_{i+j} \quad ⑦$$

并给出了系数C_j和归一化因子N_s的数值，s为微商的阶数。

（3）协方差法找峰

这是一种利用峰高参数找峰的方法。描述一个γ谱峰最简单的数学模型是：

$$y_i=\tilde{y}_0 exp[-4ln2\frac{(i-i_0)^2}{H^2}]+b_i \quad ⑧$$

其中指数部分代表幅度为1的γ峰形状（高斯形），$\tilde{y}_0$为峰址i_0的幅度（峰高），b_i为基线。从⑧式可见，$\tilde{y}_0$的大小决定了是否为一个峰，$\tilde{y}_0$越大是一个峰的可能性越大。如果把$\tilde{y}_0$变为道址i的函数，峰形函数用幅度为1的任意形式C(j)表示，对一个实验谱，逐段移动进行拟合比较，由比较获得的幅度y_i之大小来确定峰是否存在。

（4）对称零面积变换法找峰

众所周知，峰附近的二阶微分小于0，因此定义一个“负”的二阶差分 $\tilde{y}(i)$ 为：

$$\tilde{y}(i) = -\sum_{j=i-n}^{i+n}\left[y(j+H)-y(j)\right] - \left[y(j)-y(j-H)\right] \quad ⑨$$

其中：H＝2n＋1，“求和号”前面加一个“负”号，是为了使得二阶差分的极值与峰的方向一致。即峰位置附近的负二阶差分大于0，存在这个极大值。

作者用实际测得的弱放射性γ谱、重峰谱以及高基底（或强本底）上弱峰谱段进行了研究和试验。结果表明：

（1）对于弱放射性γ谱，数据光滑之前，高斯乘积函数法和协方差法不能使用，如果先作数据光滑再找峰，又容易影响重峰的分辨。第一、二、三阶数值微商法以及对称零面积变换法均可使用。

（2）高斯乘积函数法对高基底的抑制能力较差；对统计假峰的抑制能力也比较差；为弱峰识别的准确度较低。协方差法对弱峰识别的灵敏度较低，准确度仍然较差。因此，从高基底和统计假峰的抑制能力及重峰的分辨能力来看，第一、三阶数值微商结合法和对称零面积变换法是比较好的，特别是对称零面积变换法，找峰效果最好。

（3）采用第一、三阶数值微商结合法时，可以先用适当多点数的一阶数值微商公式找峰，选取适当的灵敏度常数 σ_P（用这种方法找峰，要对找出的峰作进一步的统计试验：在峰址两边各取若干道，得峰的宽度为W道，按总峰面积法，计算峰区的积分计数 N_P 和“净”峰面积 A_P。当 $(A_P/W)/\sqrt{N_P/W} > \sigma_P$ 时，该峰才被认为是有意义的峰。），以便抑制统计假峰。从简单的观点出发，还是用一阶数值微商法好，一个一阶数值微商公式，求1次一阶微商谱找峰，求3次一阶微商谱分辨重峰，起到双重作用。

（4）从高基底的抑制能力和弱峰识别的准确度来看，对称零面积变换法最好。可先用H＝4，W＝11的离散零面积高斯函数变换以抑制高基底和假峰（取 f＝2.5），然后用“窄窗”（如H＝4，W＝5）零面积高斯函数或零面积“窄”矩形波函数（如H＝1，W＝5，a＝4，b＝1）变换以分辨重峰。

因此，在计算机自动找峰程序中，最好采用对称零面积变换法。

从几种主要找峰方法的比较[7]可见，对称零面积变换法最好。因而，作者又重点研究了这种方法[9]。选用各种对称零面积函数作为变换函数，从理论计算和γ实验谱试验研究结果来看，还是零面积高斯函数较好，因为它与实际谱峰形状较一致。

3. 峰组（单峰是峰数为1的峰组）总面积的计算

对于单峰面积和峰组总面积，采用作者提出的“平均Quittner峰面积法”[10]进行计算，求出单峰或峰组总面积 A_t 及其总不确定度 U_t。

4. 峰组的拟合及峰面积计算

对于重峰或各峰部分重叠的峰组，采用高斯函数组的非线性最小二乘法拟合的方法。拟合函数为：

$$y(i,X) = \sum_{j=1}^{P} x_j exp\left[-4ln2\left(\frac{i-x_{P+j}}{x_{2P+j}}\right)^2\right] + B(i) \quad (10)$$

$$B(i) 或 lnB(i) = a_0 + a_1 i + a_2 i^2 \quad (11)$$

其中：$X=(x_1, x_2, \cdots\cdots, x_{3P})^T$ 是待定参数的集合；T是矩阵的转置；x_j 为峰组中第j个峰的峰高；x_{P+j} 为第j个峰的峰位置；x_{2P+j} 为第j个峰的半宽度；P为待拟合的峰组内峰的数目。

（1）基线B(j)的确定：

在峰组的左、右两边各取若干道，用(11)式作线性最小二乘法拟合：

$$R_b^2 = \sum_{i=1}^{n_1}\left[lnB_i - (a_0 + a_1 i + a_2 i^2)\right]^2 + \sum_{i=n_1+1}^{n_2}\left[lnB_i - (a_0 + a_1 i + a_2 i^2)\right]^2 \to min.$$

其中：n_1 为峰组左边的道数，n_2 为总道数。

$$\frac{\partial R_b^2}{\partial a_j}=0, \qquad j=0,1,2.$$

得三个线性方程组，求解此方程组，则可获得 a_0、a_1 和 a_2 的数值。

(2)峰组内各峰面积及其不确定度的计算:

由于Ge(Li)γ谱峰往往不是纯高斯形，实验证明，峰组内各个峰所占峰组总面积的分额(简称:峰分额)，不应用高斯峰面积来计算，而应由拟合求得的峰高 x_j 值来计算峰分额 R_j。即:

$$R_j=x_j \,/\, (\sum_{k=1}^{P} x_k), \quad j=1,2,\cdots\cdots,P. \qquad ⑫$$

三、计算机程序的设计编排[11]

1. 从数据文件中取谱数据，并在宽行打印机上将原始谱数据打印出来，由SPECT子程序完成。

2. 谱数据光滑，用7点离散高斯函数褶积滑动变换法。可以根据需要用人机对话方式，对任何一段谱数据进行光滑，并由操作者决定光滑的次数，或不光滑(0次)，由SMOO子程序完成。

3. 用零面积高斯函数变换法找峰及确定峰边界。首先用W=9 (或11)、H=4的零面积高斯函数变换，预设找峰阈值F，一般取F=2.5，将谱段内全部峰位置找出。再由两峰位置之间的距离确定是否为部分重叠峰。由变换谱谱峰两边的最小值确定部分重叠峰组的边界。若不是部分重叠峰，则可能是单峰或分辨不开的重峰。再将这个"单峰"，用W=5、H=4的零面积"窄"高斯函数，在峰区内再作变换，由变换谱出现大于0的极大值的个数，确定"单峰"中的真正峰数及真峰址。为了避免弱峰统计涨落引起的误判，一是先作数据光滑再找峰，二是对假单峰再作判断，峰区宽度大于一定值才是真峰，否则为统计涨落引起的假单峰。

4. 对于单峰，没有峰拟合步骤，直接用平均Quittner法计算峰面积;同时计算边界统计涨落引起的不确定度、峰区计数统计涨落引起的不确定度和总不确定度，并打印出来(注:为了了解高斯函数的拟合情况，暂时还安排了对单峰的拟合，并打印出来)。这一步由QUIME子程序来完成。

5. 对于重峰或各峰部分重叠的峰组，先在峰组两边各取若干道(5 ~ 10道)，用二或三次多项式或半对数二次多项式进行线性最小二乘法拟合以确定基线参数。程序中设计了检验拟合好坏的步骤，如果第一次拟合不满意，则自动增加两个数据点，进行再拟合，直到获得满意的拟合为止。该步骤由BACK子程序完成。

然后，用纯高斯函数之叠加再加上参数已确定的基线函数作为分析函数，与峰组数据进行非线性最小二乘法拟合。由拟合获得的峰高求出各个峰在峰组内所占的分额。这一步由NLL子程序完成。再调用QUIME子程序，按平均Quittner峰面积法，计算峰组的总面积及其总不确定度。最后，将此总面积按上面拟合求得的峰分额进行分配，求出峰组内各个峰的峰面积。

参考文献

〔1〕庞巨丰等，放射医学与防护，3(1974)10
〔2〕庞巨丰，放射医学，1(1977)47
〔3〕庞巨丰，放射医学，1(1977)59
〔4〕庞巨丰，《Ge(Li)和Ge(Li)反康普顿γ谱的分析》全国γ能谱学习班讲义之一，(1985)P296 ~326
〔5〕庞巨丰等，核仪器与方法，4(3)，(1984)51
〔6〕庞巨丰等，原子能科学技术，2(1985)180
〔7〕庞巨丰等，计量学报，5(3)，(1985)213
〔8〕A.Savitzky et al.,Anal.Chem.36(1964)1627
〔9〕庞巨丰等，原子能科学技术，21(3)，(1987)270
〔10〕庞巨丰等，核技术，12(1986)25
〔11〕庞巨丰等，"一个新的Ge(Li)γ谱峰自动分析程序"，将发表于《核技术》