

基于特征函数的 NaI γ 能谱高斯峰面积计算

顾 民 葛良全

(成都理工大学地球核技术四川省重点实验室 成都 610059)

摘要 γ 能谱峰面积计算方法主要包括累加计数的峰面积法和高斯函数最小二乘拟合峰面积法。采用高斯函数最小二乘拟合法, 须进行矩阵求逆运算, 计算量较大, 且该方法对噪声较敏感。本文通过高斯函数的第二特征函数得到高斯函数的幅值、中心及方差, 计算高斯峰的面积。实例证明, 此法不但速度快, 而且对噪声不敏感。

关键词 γ 能谱, 峰面积, 最小二乘拟合, 特征函数
中图分类号 P631

在能谱分析中, γ 射线照射量率由能谱特征峰面积确定, 故准确确定峰面积非常重要。峰面积确定法有累加计数法和函数拟合法。累加计数的峰面积是全能峰区全部或部分道上计数的累加, 主要包括总峰面积法、科沃尔峰面积法和瓦森峰面积法。函数拟合峰面积法包括扣除本底后净峰拟合法以及峰形函数加基底函数拟合的峰面积法^[1]。采用高斯函数或修正高斯函数最小二乘方法进行拟合, 常需矩阵求逆运算, 计算量较大, 且对噪声较敏感。对 γ 多道谱分析方法的研究主要集中在^[2,3]: 用 MC 法模拟光子在探测器中的能量沉积、响应及传输特性; 用各种滤波技术提取有用信息; 能量窗法提取感兴趣区域核素信息; 其他解谱方法(逆矩阵等)提取感兴趣区域信息。本文探讨利用特征函数计算高斯峰的参数, 从而计算高斯净峰面积的方法。

1 高斯随机变量的特征函数

定义 1 令随机变量 x 具有概率密度 $f(x)$, 其第一特征函数定义为积分^[4]:

$$\Phi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{j\omega x} dx = E(e^{j\omega x}) \quad (1)$$

第一特征函数实际上是密度函数 $f(x)$ 的傅里叶变换。其第二特征函数定义为:

$$\psi(\omega) = \ln \Phi(\omega) \quad (2)$$

对于高斯随机变量, 有如下定理^[4]:

若 ξ 是具有均值为 μ 、方差为 σ^2 的高斯随机变量, 即 $\xi \sim N(\mu, \sigma^2)$, $|\mu| < \infty$ 与 $\sigma^2 > 0$, 则其第一特征函数为:

$$\Phi_{\xi}(\omega) = e^{j\omega\mu - (1/2)\omega^2\sigma^2} \quad (3)$$

由此可知, 对于幅值为 A 、均值为 μ 、方差为 σ^2 的高斯函数 $f(x) = A \exp[-(x-\mu)^2/(2\sigma^2)]$, 由于 $f(x)$ 可能不是密度函数, 为称呼方便, 我们仍沿用第一特征函数和第二特征函数的名称。

$f(x)$ 的第一特征函数 $\Phi(\omega)$ 为:

$$\Phi_x(\omega) = B e^{j\omega\mu - (1/2)\omega^2\sigma^2} \quad (4)$$

其中 $B = A/[(2\pi)^{1/2}\sigma]$ 。

$f(x)$ 的第二特征函数 $\psi(\omega)$ 为:

$$\psi(\omega) = \ln \Phi(\omega) = \ln B + j\omega\mu - 1/(2\sigma^2\omega^2) \quad (5)$$

将第二特征函数 $\psi(\omega)$ 按照 Taylor 公式在 $\omega = 0$ 点展开:

$$\psi(\omega) = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} \frac{d^k \psi(\omega)}{d\omega^k} \Big|_{\omega=0} (j\omega)^k + o(\omega^n) \quad (6)$$

由式(5)和式(6), 可得

$$\ln B = \psi(0) \quad (7)$$

$$\mu = d\psi/d\omega \Big|_{\omega=0} \quad (8)$$

$$\sigma^2 = d^2\psi/d\omega^2 \Big|_{\omega=0} \quad (9)$$

由式(7)–(9), 可利用高斯函数 $f(x)$ 的第二特征函数 $\psi(\omega)$ 求出高斯函数的三个参数 A 、 μ 、 σ ; 则高斯峰面积为^[1]

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} A \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right] dx = 2.507\sigma A \quad (10)$$

对于 n 个有限点, 公式(1)的离散化表示方法为:

$$\Phi(\omega) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(k)e^{j\omega k} = \sum_{k=-n}^n f(k)e^{j\omega k} \quad (11)$$

国家自然科学基金(40774063)和国家 863 计划(2006AA06A207)资助

第一作者: 顾 民, 男, 1971 年出生, 2008 年于成都理工大学获博士学位, 副教授, 研究方向: 核信息处理技术

收稿日期: 2009-05-08, 修回日期: 2009-07-24

式(11)可以用矩阵的方法实现

$$\Phi(\omega) = (f) \times (En) \tag{12}$$

其中 $\Phi(\omega) = [(\Phi(\omega_{-n}), \Phi(\omega_{-n+1}), \dots, \Phi(\omega_0), \dots, \Phi(\omega_n))]$,
 $f = (f_1, f_2, \dots, f_m)$

$$En = \begin{bmatrix} e^{j(-n)/N} & \dots & 1 & \dots & e^{jn/N} \\ e^{j2(-n)/N} & \dots & 1 & \dots & e^{j2n/N} \\ \vdots & \dots & 1 & \dots & \vdots \\ e^{jm(-n)/N} & \dots & 1 & \dots & e^{jmn/N} \end{bmatrix} \tag{13}$$

对于离散数据，导数一般用差分表示，因此根据式(8)、(9)有

$$\mu = d\psi/d\omega|_{\omega=0} = \psi(1) - \psi(0) \tag{14}$$

$$\sigma^2 = d^2\psi/d\omega^2|_{\omega=0} = \psi(2) - \psi(0) \tag{15}$$

从以上分析可知，可构造一个算法，利用累积量生成函数 $\psi(\omega)$ 得到高斯函数的三个参数：幅值、中心以及方差，从而计算高斯峰的面积。

2 算法与实例分析

2.1 算法步骤

(1)谱峰平滑处理；(2)谱峰峰位和峰底确定；(3)利用指数函数法进行本底的扣除；(4)按照公式(12)求出第一特征函数 $\Phi(\omega)$ ；(5)按照公式(2)求出累积量生成函数 $\psi(\omega)$ ；(6)按照式(7)、(14)、(15)求出 $\psi(\omega)$ 原点值、一阶导数的原点值和二阶导数的原点值。得到高斯函数的幅值 A 、中心 μ 及方差 σ ；(7)按照式(10)计算峰面积。

2.2 特征函数法和高斯函数拟合法比较

在高斯函数上叠加程度不同的噪声，比较特征函数法和高斯拟合法计算高斯面积的性能。图 1 为不同信噪比(SNR)下特征函数法与高斯函数拟合法计算出的面积相对误差曲线(SNR=10 lg(P_y/P_n), P_y 为信号功率, P_n 为噪声功率)。其中面积相对误差为计算出的面积减去实际面积再除以实际面积。

由图 1，高斯拟合法计算峰面积对噪声比较敏感，而特征函数法对噪声具有稳健性，其面积误差随噪声增加而逐渐上升，而且特征函数法计算量比高斯函数拟合法小，因此，特征函数法比高斯函数拟合法在计算净峰面积上性能更优良。

2.3 实例分析

利用一个 1024 道 NaI γ 能谱仪测得的天然 γ 能谱的钾峰进行分析。天然 γ 能谱图见图 2，图 3 是

钾峰原始谱线及其平滑后的谱线，图 4 是扣除本底后平滑谱线的第二特征函数曲线。可以看出，第二特征函数曲线是标准的二次函数曲线。图 5 是由本文算法计算出的幅值、中心以及方差后构造的高斯函数和平滑、扣本底后的钾-40 峰测定谱，两者非常接近。

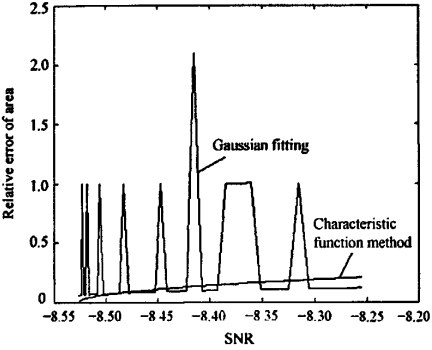


图 1 特征函数法和高斯拟合法面积误差的比较
Fig.1 Comparison of area error between Gaussian fitting and characteristic function method.

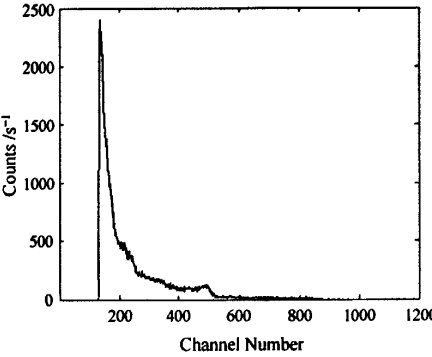


图 2 天然伽玛能谱图
Fig.2 Background gamma spectrum.

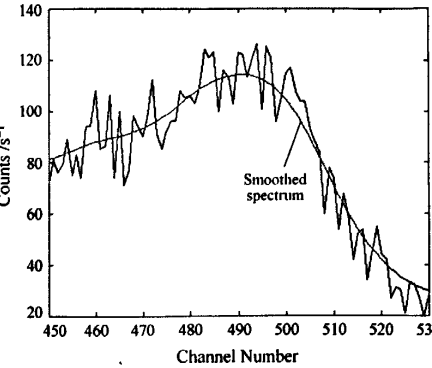


图 3 钾-40 峰原始谱线及其平滑后的谱线
Fig.3 Original spectrum and the smoothed spectrum of ^{40}K peak.

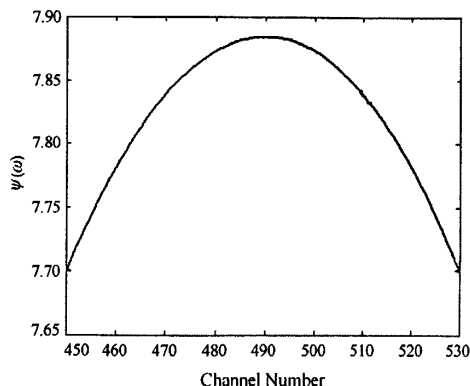


图 4 钾-40 峰第二特征函数曲线

Fig.4 The second characteristic function of ^{40}K γ -ray peak.

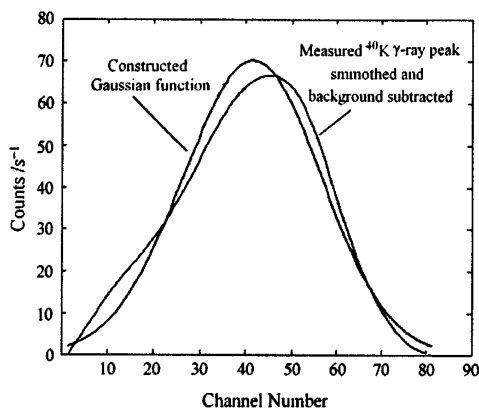


图 5 构造的高斯函数和 ^{40}K γ 峰实测谱 (光滑并去本底)
Fig.5 The constructed Gaussian function and measured ^{40}K γ -ray peak (smoothed and background subtracted).

3 结论

函数拟合峰面积法采用最小二乘法进行拟合, 须进行矩阵求逆运算, 计算量较大。本文通过高斯函数的第二特征函数得到高斯函数的幅值、中心及方差, 计算高斯峰的面积。文章首先用高斯函数叠加噪声比较特征函数法和高斯拟合法计算高斯面积的性能, 指出高斯拟合法对噪声较敏感, 而利用特征函数计算高斯净峰面积, 计算量小、精度高, 且对噪声不敏感。实例验证了该方法是一种性能较优良的高斯峰面积计算方法。

参考文献

- 1 庞巨丰. γ 能谱数据分析. 西安: 陕西科学技术出版社, 1990
PANG Jufeng. Gamma spectrometer data analysis. Xian: Shanxi Science and Technology Publishing House, 1990
- 2 Allyson J D, Sanderson D C W. J Environ Radioact, 2001, 53: 351-363
- 3 Guillot L. J Environ Radioact, 2001, 53: 381-398
- 4 张贤达. 时间序列分析——高阶统计量方法. 北京: 清华大学出版社, 1996
ZHANG Xianda. Time series analysis—High order statistic method. Beijing: Tsinghua University Press, 1996

Gaussian peak area computation of NaI gamma spectrometry based on the eigenfunction

GU Min GE Liangquan

(Provincial Key Lab of Applied Nuclear Techniques in Geosciences, Chengdu University of Technology, Chengdu 610059, China)

Abstract The method of Gaussian peak area computation includes count accumulation method and least squares fitting of Gaussian function. The latter is based on solving inverse matrix. This requests considerable computing time, and is sensitive to noise. In this article, we obtain the amplitude, center and variance of Gaussian function by using the second eigenfunction of Gaussian function, and area of Gaussian peak is calculated. Results of applying this new method to γ -ray spectra analysis show that it is not only of quick speed but also insensitive to noise.

Key word Gamma spectrometry, Peak area, Least squares fitting, Eigenfunction

CLC P631