

♀
Объединенный
институт
ядерных
исследований
Дубна

3262/2-81

29/6-81

P10-81-204

В.Б.Злоказов

МЕТОД ДЛЯ АВТОМАТИЧЕСКОГО
ПОИСКА ПИКОВ В γ -СПЕКТРАХ

Направлено в "Nuclear Instruments and Methods"

1981

ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на то, что число программ, осуществляющих полный цикл автоматической обработки аппаратурных γ -спектров и спектров X-лучей, является значительным /см. работы ^{1,9}/, а также ссылки в работе ⁴ /, усилия исследователей по усовершенствованию этих программ не прекращаются, а проблема повышения качества их работы /фактически повышение доли успехов в случае сложных участков спектров/ продолжает оставаться актуальной, и ее решение требует как совершенствования физической модели, лежащей в основе алгоритмов, так и привлечения более сложных математических методов /естественно, снижающих быстродействие автоматического анализа спектров, что, по-видимому, неприемлемо для случаев простых спектров или нестрогих требований к точности анализа/. В данной статье речь пойдет о первой части автоматической обработки спектров - поиске пиков и разметке спектра, т.е. разбивке его на участки, содержащие возможно минимальное количество пиков, и фон по краям.

В настоящее время стали классическими варианты методов 1-й и 2-й производных ¹⁰ и /в меньшей мере/ варианты корреляционного метода ^{7,8}. Эффективность этих методов /в средних и сложных случаях/, как показывает практика, а также результаты сравнения методов обработки γ -спектров ¹², далеко не идеальна.

Недостатки методов следующие:

1/ производные и амплитуда функции не являются независимыми характеристиками этой функции, и их успешное использование требует тонких настроек для каждого спектра, что, однако, резко снижает возможность полной автоматизации метода поиска пиков с их помощью при обработке потоков спектров;

2/ операция свертки /вне комбинаций с другими приемами/ является все же недостаточно эффективным средством в процедурах распознавания образов;

3/ процедура подавления фона ориентирована на тривиальные участки фона - линейные куски, и, кроме того, деформирует пики;

4/ низка эффективность в распознавании дублетов /как близких линий одинаковой амплитуды, так и очень интересной комбинации: малый пик в тени большого/;

5/ полностью игнорируется физическое содержание спектрометрической информации; между тем часто бывает заранее известен

качественный состав / точно или приближенно/ образца, спектр которого анализируется, или же экспериментатора интересуют лишь определенные линии данного спектра; в этом случае заданный список линий, переведенных с помощью обратной калибровки в каналы, мог бы оказать существенную помощь в разметке спектра, или, по крайней мере, исключил бы из анализа неинтересные линии.

Метод, излагаемый в данной работе, преследует цель алгоритмизации процесса визуального анализа графика спектра. Для этого спектр разбивается на участки, границами которых являются явно фоновые точки /локальные минимумы/. Каждый участок сглаживается с помощью фильтра сплайнового типа, затем из него с помощью другого фильтра /такого же типа/ устраняется фон. Остаток описывается в терминах формальных признаков, таких, как амплитуда, кривизна и свойства максимума амплитуды и кривизны. Понятие кривизны дискретной функции является существенной чертой метода. Оно определяется как приближенное отношение 2-й производной к 1-й и служит точечной характеристикой геометрических фигур, не зависящей от их амплитуды. Так как визуальное распознавание фигур сводится к фиксации характерных "критических" точек графиков этих фигур, то поиск пиков осуществляется путем сравнения описаний каждой точки исследуемого участка спектра с эталонами пика, составленными в терминах упомянутых характерных точек.

Предполагаемые пики далее проверяются на соответствие статистическим критериям, критериям формы и т.д. Таким путем обнаруживаются одиночные и явно разрешенные мультиплеты и отсеиваются ложные пики. Далее идет выявление скрытых/неявных/мультиплетов с помощью специальной характеристической функции, использующей информацию о форме одиночного пика и априорную оценку полуширины. Затем строятся участки, содержащие найденные одиночные пики /или мультиплеты/ и фон по краям.

Помимо геометрической разметки, есть возможность использовать априорные сведения о вероятном присутствии тех или иных энергетических линий непосредственно или посредством указания предполагаемого изотопного /элементного для спектров X -лучей/ состава образца, спектр которого анализируется.

§1. СГЛАЖИВАНИЕ СПЕКТРА

Первой подготовительной процедурой является сглаживание спектра, т.е. подавление в нем статистических осцилляций. Она состоит из двух этапов:

- 1/ поиск и исправление грубых помех - выбитых точек;
- 2/ подавление "нормальных" статистических флуктуаций.

Сглаживание не является тривиальной процедурой вследствие сильной нестационарности спектра, рассматриваемого как случайный процесс. Так как цель поиска пиков - фактически построение аналитического представления функции спектра, мы не можем использовать фильтры, явно или неявно использующие такое представление /регрессионные, Кальмана-Бьюси и т.д./. Далее сглаживание осложняется тем обстоятельством, что пики - информативная компонента спектра - захватывают почти весь частотный диапазон, хотя с наибольшими весами в них представлены частоты среднего диапазона. Это делает почти неприменимым аппарат частотных фильтров и заставляет при сглаживании широко использовать амплитудные характеристики данных.

1/ Устранение грубых помех основано на представлении об одином выбросе как о месте, где резко нарушается непрерывность кривой, описывающей спектр. Алгоритм состоит в следующем: для каждой i -й точки производится проверка того, могут ли 4 соседних значения спектра /2 слева от i , и 2 справа/ быть фитированы некоторой плавной кривой, например, параболой. Если могут /т.е. χ^2 подгонки является приемлемым/, то участок считается плавнотеняющимся, и проверяется, не отличается ли значение спектра в точке i от соответствующего значения параболы слишком сильно:

$$w(i) (s(i) - p(i))^2 \gg G, \quad /1.1/$$

где $s(i)$, $p(i)$, $w(i)$ - значения спектра, параболы, веса в i -й точке, G - уровень допустимого отклонения. Если /1.1/ имеет место, то $s(i)$ считается выбросом и заменяется на $p(i)$.

Если 4 значения спектра не фитируются параболой, i -я точка пропускается.

Дополнительно используется также следующее соображение. Выбросы, в частности, могут быть обусловлены произвольным изменением разрядов /сбойного характера/ регистров анализатора, в котором накапливается спектр. Это дает следующий критерий для проверки значения на выброс: если статистика спектра достаточно большая и значение спектра в i -й точке в 1,5 раза меньше или больше, чем полусумма соседних значений, то здесь мы тоже явно имеем дело с выбросом.

2/ Математические основы алгоритма подавления высокочастотных осцилляций в спектре рассмотрены в работе^{/18/}. Здесь будет дано лишь их качественное изложение. Идеи, лежащие в основе этого метода, следующие:

а/ вводится понятие меры осцилляций дискретной функции;

б/ сглаженная кривая получается на основе требования: построить функцию, повторяющую грубый контур исходной функции, но без осцилляций последней. Пусть $s(x)$ - исходный спектр,

в котором устранены выбитые точки /если таковые имелись/. Тогда мера осцилляций функции $s(x)$ имеет вид ^{'13/}:

$$\eta = \sum_i e_i (s_{i+1} - 2s_i + s_{i-1})^2, \quad i = 1, \dots, i_m, \quad /1.2/$$

где $e_i = 1/(1+s_i^2)$, s_i - сглаженная каким-либо способом 1-я производная /разность/ дискретной функции s_i .

Используя /1.2/, мы можем получить сглаженный спектр f_i из исходного s_i как решение следующей задачи минимизации: минимизировать меру осцилляций функции f_i и одновременно ее расстояние от функции s_i :

$$\min \{ \sum e_i (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})^2 + \lambda \sum (f_i - s_i)^2 \} \quad /1.3/$$

при граничных условиях $f_0 = s_0$, $f_m = s_m$, $f'_0 = 0$, $f'_m = 0$.

Здесь e_i - веса того же типа, что и в выражении /1.2/, а λ - множитель Лагранжа.

Минимизация 1-го члена в /1.3/ подавляет осцилляции; минимизация 2-го члена обеспечивает близость функции f_i к грубому контуру функции s_i . Множитель λ может быть аргументом минимизации, но обычно он фиксируется /будучи нормирован на величину $\sum e_i / m$ / и выбирается из следующих соображений: если надо увеличить гладкость функции f_i , то λ следует уменьшить, если же надо увеличить степень близости f_i к s_i , то λ следует увеличить. Благодаря нормировке множитель λ слабо зависит от амплитуд спектра s_i и может быть определен с помощью тестов.

В этом параграфе следует также упомянуть процедуру сглаживающего характера, используемого при поиске пиков с исключительно бедной статистикой /5-40 отсчетов в канале/. Это - преобразование простого типа, например:

$$s(i) = (s(i-1) + s(i))/2,$$

поскольку при обработке серий с такой малой статистикой вопросы возможной деформации полезных компонент перестают играть существенную роль.

§2. ПОДАВЛЕНИЕ ФОНА

Широко распространенный метод подавления фона с помощью 2-й производной ^{/10/} вряд ли можно считать удачным, т.к. при этом подавляются лишь тривиальные части фоновой подложки - куски прямой линии. Менее тривиальные участки фона остаются, вдобавок форма пиков при этом искажается. Более точным спосо-

бом подавления фона будет построение фильтра, аналогичного фильтру /1.3/. Основные идеи, лежащие в его основе, следующие:

а/ отфильтрованная кривая должна огибать грубый контур спектра снизу, т.е. амплитуда этой кривой должна быть близка значениям спектра в его низкой части и не близка в высокой;

б/ фон плавно меняется от канала к каналу;

в/ истинный фон меньше истинного спектра или равен ему.

Математическая реализация положений а/-в/ означает:

1/ спектр s_i сглаживается с помощью фильтра /1.3/; получается сглаженный спектр \bar{s}_i ;

2/ фон b_i получается из s_i процедурой

$$\min \left\{ \sum_{i=1}^{n-1} (b_{i+1} - b_i)^2 + \eta \sum w_i (s_i - b_i)^2 \right\} \quad /2.1/$$

при условии $b_i \leq s_i$. Здесь η - скаляр, аналогичный λ в /1.3/, $w_i = 1/s_i$ - веса. 1-й член в /2.1/ обеспечивает плавность изменений фона, веса w_i позволяют сильно отличаться от больших значений s_i , и не сильно отличаться от малых значений s_i . Условие $b_i \geq s_i$ реализует пункт в/ требований к фильтру. Скаляр η регулирует соотношение вкладов в функционал /2.1/ 1-го и 2-го членов. Если надо увеличить плавность фона, следует уменьшить η , если увеличить близость /взвешенную/ фона к спектру, следует увеличить η . Детали численной реализации фильтра /2.1/ даны в работе /13/.

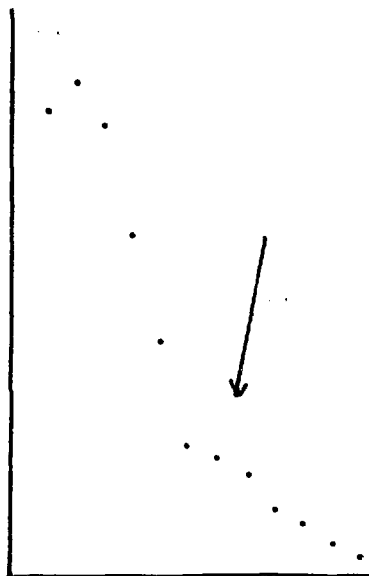
§3. ПОИСК ПИКОВ ПО ГЕОМЕТРИЧЕСКИМ ПРИНЦИПАМ

После устранения осцилляций и подавления фона в проверяемом интервале спектра в идеальном случае остаются чистые пики с неискаженной формой. Дальше можно было бы искать локальные максимумы и проверять их с помощью статистических критериев. Однако такой метод был бы слишком примитивен по следующей причине: визуальный поиск обнаруживает пики не только по свойству максимума амплитуды, но и по некоторым геометрическим характеристикам, таким, как, например, резкий излом направления кривой спектра в мультиплете /см. рис.1/ и т.д. Это особенно важно для γ -спектров, анализируемых в научных целях, где наибольший интерес представляют маленькие пики, скрытые в тени больших.

Поскольку цель данного метода - алгоритмизация приемов визуального поиска пиков, был использован следующий подход:

а/ разработана система геометрических характеристик для точечного описания дискретной кривой;

Рис.1. Комбинация: малый пик в "тени" большого.



б/ в терминах этих характеристик составлено эталонное описание характерных точек геометрической фигуры, являющейся предметом опознавания на первом этапе поиска, - неразрешенного мультиплета, т.е. пикообразной кривой с единственным максимумом /в частности, изолированного пика/;

в/ составлялись в терминах этих характеристик описание каждого значения спектра /после сглаживания и вычитания фона/ и каждое такое описание сравнивалось с эталоном; в случае совпадения соответствующая точка считалась характерной точкой пика;

г/ предполагаемые пики затем проверялись на соответствие статистическим критериям и критерию формы;

д/ далее с помощью специальной характеристической функции найденные пики анализировались на мультиплетность.

Пусть s_i, \bar{s}_i, b_i - спектр, сглаженный спектр и фон в канале соответственно. Из визуального анализа образов пиков в реальных γ -спектрах следует, что характерными точками пикообразной фигуры являются /см. рис.1 и 2/: подножие (F) вершина (T), седловина (S), изгиб (B).

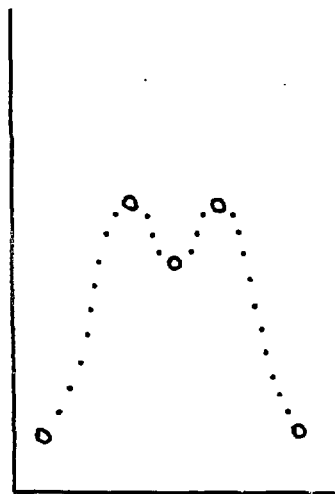


Рис.2. Характерные точки пикообразных фигур.

Введем теперь важное для дальнейшего понятие кривизны $c(x)$ целочисленной дискретной функции $f(x)$:

$$c(x) = \frac{f''(x)}{\sqrt{1+f'(x)^2}}. \quad /3.1/$$

Дискретный аналог /3.1/ имеет вид:

$$c_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\sqrt{1+(f_{i+1}-f_i)^2}}. \quad /3.2/$$

Выражение /3.2/ обладает важным свойством. При замене $f(x)$ на $Af(x)$ c_i почти не меняется

$$c_i = \frac{Af_{i+1} - 2Af_i + Af_{i-1}}{\sqrt{1+A^2(f_{i+1}-f_i)^2}} = c_i,$$

если $|f_{i+1}-f_i| \gg 1$.

Это свойство делает c_i характеристикой, не зависящей от подобных преобразований геометрической фигуры, описываемой функцией $f(x)$, что очень важно при поиске пиков, поскольку при анализе спектров малые пики представляют не меньший интерес, чем большие, и автоматическая процедура поиска может быть снабжена значениями c_i в характерных точках пиков, вычисленными один раз на эталонах таких пиков.

Теперь введем следующие признаки для описания точек спектра:

$$1/ \text{ амплитуда } A_i = \begin{cases} 0, & \text{если } s_i \leq \text{err}_i \\ 1, & \text{иначе} \end{cases}$$

$$2/ \text{ кривизна } c_i = \begin{cases} -1, & \text{если } c_i < -\text{const} \\ 0, & \text{если } |c_i| \leq \text{const} \\ +1, & \text{если } c_i > +\text{const} \end{cases}$$

$$3/ \text{ максим } \begin{cases} -1, & \text{если } s_i = \min(s_i, s_{i+1}, s_{i-1}) \\ \text{амплитуды } M_i = 0, & \text{иначе} \\ +1, & \text{если } s_i = \max(s_i, s_{i+1}, s_{i-1}). \end{cases}$$

Здесь err_i - ошибка спектра s_i в i -м канале, const - константа, вычисленная на модельных пиках, равная по модулю нижней грани значений кривизны в вершинах и других точках резкого изгиба спектральной кривой /см. рис.1,2/, позволяющих предположить наличие пика в данном месте. Для эталонных характерных точек значения этих признаков равны:

F(foot) = A = 0	C = -1,0,+1	M = -1,0,+1
T(top) = A = 1	C = -1	M = +1
S(saddle) = A = 1	C = +1	M = -1
B ⁺ (bend) = A = 1	C = +1	M = 0
B ⁻ (bend) = A = 1	C = -1	M = 0.

Остальные точки спектра соответствуют всем остальным комбинациям значений данных признаков. Обозначим их символом $_$ (blank). Тогда формальная грамматика для описания чистого /без фона/ спектра строится так/если заменить Т на Р/:

I /строка символов/	\rightarrow FHF;	/участок спектра между двумя подножиями/
H /участок спектра/	\rightarrow ;	/чисто фоновый участок/
H \rightarrow P;		/участок с 1-м пиком - идеальный случай/
H \rightarrow HSP; H \rightarrow PSH		/участок с частично разрешенным мультиплетом/;
H \rightarrow V^-V^+P ; H \rightarrow PV^+V^-		/участок с визуально опознаваемым мультиплетом/;
H \rightarrow V^-V^+PSH ; H \rightarrow $HSPV^+V^-$		/комбинация/.

Предложения, порождаемые этой грамматикой, суть строки символов: FPF, FPSPF, FV^-V^+PF , PV^+V^-F , FV^-V^+PSPF , $FPSPSPF$,..., которым соответствуют участки спектра, изображенные на рис. 2.

Обработка таких строк тривиальна: символу Р соответствует пик /в общем случае мультиплет, не разрешенный ни явно, ни скрыто/, комбинации PSP - 2 пика, группы V^+V^- и V^-V^+ заменяются на PS или SP и т.д. Следовательно, если мы последовательность значений участка спектра преобразуем в последовательность, состоящую из символов F, P, S, V^+ , V^- , то, опуская символ $_$, мы далее можем выделять группы символов между буквами F и строить гипотезы о наличии пиков согласно вышеприведенному алгоритму. К сожалению, ситуация осложняется тем, что реальные участки могут давать некорректные примыкания символов друг к другу /из-за осцилляций, не устраненных фильтрацией; из-за нарушений гладкости спектральной кривой и т.д./:

а/ символы F, P, S между символами V^+ и V^- ;

б/ примыкание V^+V^- /или V^-V^+ / к S;

в/ пары PP, SS;

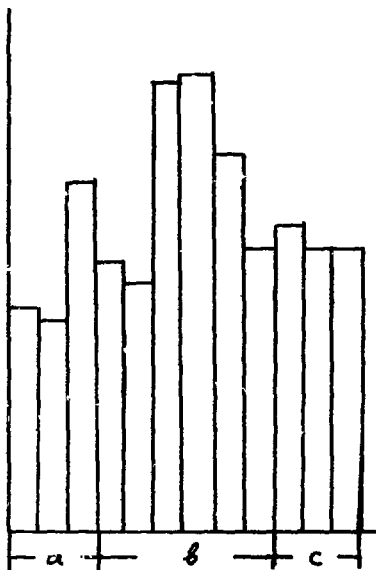
г/ примыкание S к F и так далее.

В таких случаях приходится осуществлять повторный просмотр предыдущих символов с целью получения корректной строки.

§4. КРИТЕРИИ ОБНАРУЖЕНИЯ ПИКА

В результате работы алгоритма распознавания §3 мы получаем гипотезы о пиках /символы P/ и их границах /символы F/. Однако далее следует проверить обнаружение пика с помощью статистических критериев и критериев формы. Дадим строгую формулировку этих критериев.

Рис.3. Сравнение двух сумм пуассоновских случайных величин на совпадение.



Более общим понятием, чем пик, является понятие эффекта, которое можно определить так /см. рис.3/. Дан набор статистически независимых значений величин f_i , распределенных в каждой точке по закону Пуассона. Мы строим

$$S_1 = \sum_{i \in a} f_i + \sum_{i \in c} f_i, \quad S_2 = \sum_{i \in b} f_i$$

и хотим знать, совпадают ли /в статистическом смысле/ суммы S_1 и S_2 . Рассмотрим для этого величину

$$n = \frac{S_2 - S_1}{\sqrt{S_2 + S_1}}. \quad /4.1/$$

Если математические ожидания S_2 и S_1 равны, то легко показать, что n имеет распределение, стремящееся к нормальному при росте статистики f_i . Действительно, запишем

$$n = \frac{n_1 \cdot n_2}{k} = \frac{S_2 - S_1}{k} \cdot \frac{k}{\sqrt{S_2 + S_1}},$$

где $k = \sqrt{2m}$, m - математическое ожидание /дисперсия/ S_1 . Характеристическая функция n_1 равна

$$f(t) = e^{m(e^{it/k} + e^{-it/k} - 2)}.$$

S_1 мы можем считать суммой N пуассоновских случайных величин, и тогда $m = rN$; используя разложение $e^{\pm it/k}$ в ряд Тейлора, можно видеть, что

$$\lim_{N \rightarrow \infty} f(t) = e^{-t^2/2},$$

т.е. n_1 имеет в пределе нормальное распределение с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией.

На основании закона больших чисел n_2 сходится по вероятности к 1, откуда можно ожидать приближенную нормальность /4.1/.

Тогда критерий отсутствия эффекта гласит: пусть область (а,с) является фоновой, а область "b" проверяется на наличие эффекта; если для заданного уровня значимости статистика /4.1/ не противоречит гипотезе о нормальном распределении $N(0,1)$, то данные f_i не противоречат гипотезе об отсутствии эффекта, т.е. о совпадении S_2 и S_1 . Соответственно, противоречие может рассматриваться как непрямо указание на наличие эффекта.

Конечно, было бы лучше сформулировать такое правило в виде некоторого равномерно наиболее мощного критерия, который при заданной вероятности отвергнуть правильную гипотезу давал бы максимальную вероятность отвергнуть неправильную. Но это трудно сделать, т.к. трудно дать содержательное определение понятия эффекта. Поэтому мы вынуждены довольствоваться критерием /4.1/. Его свойства следующие:

а/ эффект трактуется как значительное превышение площади S_2 над S_1 ;

б/ критерий /4.1/ не зависит ни от формы фона, ни от формы области, содержащей возможный эффект.

В γ -спектрах фон, и эффект /или пик/ трактуются более специфично, на них накладывается ограничение формы. Для обнаружения пика /истинного/ критерия площадей, рассмотренного выше, недостаточно, т.к. значительное превышение площади фона в некоторой области спектра может быть обусловлено, например, выбитыми точками или ложными пиками /внешне отличающимися от истинного пика формой/. Поэтому для идентификации истинных пиков и отсева ложных в данной работе используются дополнительно два критерия, связанные с формой: а/ критерия амплитуд; б/ критерий плеч пиков.

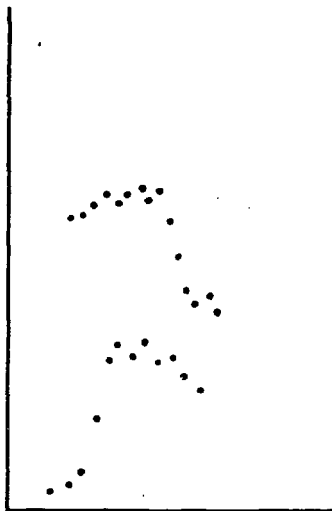
Первый состоит в том, что строится величина, аналогичная /4.1/ для амплитуд и оценок фона в точке максимума предполагаемого пика и двух соседних с ним точках:

$$a_i = \frac{f_i - b_i}{\sqrt{f_i + b_i}}, \quad a_{i-1} = \frac{f_{i-1} - b_{i-1}}{\sqrt{f_{i-1} + b_{i-1}}}, \quad a_{i+1} = \frac{f_{i+1} - b_{i+1}}{\sqrt{f_{i+1} + b_{i+1}}}, \quad /4.2/$$

i - номер канала, где предполагаемый пик имеет максимум f_i, b_i значения спектра и фона в i -м канале.

Каждая из величин /4.2/ имеет распределение, близкое к нормальному /при большой статистике f_i и b_i / , и тогда критерий амплитуд гласит: одновременный выход всех трех величин a_i, a_{i-1}, a_{i+1} за пределы соответствующих доверительных интервалов указывает на наличие пика. Этот критерий позволяет браковать одиночные выбитые точки и статистические выбросы. Он рассчитан на γ -спектры с типичной шириной пика /3-6 каналов/ и с немалой статистикой /не ниже 40-50 отсчетов в канале/. Для

Рис.4. Пикообразные фигуры, не удовлетворяющие критерию плеч.



отсева краев комптоновского рассеяния и некоторых других пикообразных образований /см. рис.4/ предлагается критерий плеч, качественная формулировка которого гласит: признаком истинного пика служит также статистически значимый спад амплитуды по обе стороны от максимума на расстоянии, не меньшем полуширины пика, т.е. должно выполняться условие:

$$f_i - b_i > k_i \cdot \sqrt{f_i + b_i} \quad /4.3/$$

при $i = i_0 + 1, i_0 + 2, i_0 + 3, \dots, i_0 + M$
и $i = i_0 - 1, i_0 - 2, \dots$, здесь i_0 - канал максимума, k - нарастающая по обе стороны от максимума величина, учитывающая то обстоятельство, что амплитуда пика должна уменьшиться по обе стороны от максимума. Если же ни для одного $i = i_0 - 1, i_0 - 2, \dots$ или ни для одного $i = i_0 + 1, i_0 + 2, \dots$ не выполняется /4.3/ /т.е. проверяемая фигура похожа на изображенная рис.4/, гипотеза о пике отвергается.

Результатом применения предыдущих процедур являются гипотезы о наличии в определенных местах спектра пикообразных фигур, удовлетворяющих статистическим критериям и критериям формы. Однако эти фигуры не обязательно являются одиночными пиками. В частности, они могут быть неявными мультиплетами. Визуальное распознавание таких мультиплетов основано на использовании критерия полуширины или критерия формы пика, а именно - если полуширина такой фигуры значительно больше ожидаемой или ее форма отличается от стандартной формы отдельного пика, то экспериментатор склонен полагать, что фигура является мультиплетом. Реализация подобной процедуры в виде алгоритма имеет следующий вид. Остаток спектра /после предыдущих преобразований/ $s(x)$ есть сумма n функций пикообразных фигур $P_i(x)$:

§5. РАЗРЕШЕНИЕ МУЛЬТИПЛЕТОВ

Результатом применения предыдущих процедур являются гипотезы о наличии в определенных местах спектра пикообразных фигур, удовлетворяющих статистическим критериям и критериям формы. Однако эти фигуры не обязательно являются одиночными пиками. В частности, они могут быть неявными мультиплетами. Визуальное распознавание таких мультиплетов основано на использовании критерия полуширины или критерия формы пика, а именно - если полуширина такой фигуры значительно больше ожидаемой или ее форма отличается от стандартной формы отдельного пика, то экспериментатор склонен полагать, что фигура является мультиплетом. Реализация подобной процедуры в виде алгоритма имеет следующий вид. Остаток спектра /после предыдущих преобразований/ $s(x)$ есть сумма n функций пикообразных фигур $P_i(x)$:

$$s(x) = \sum_{i=1}^n P_i(x) = \sum_{i=1}^n P(x-t_i), \quad /5.1/$$

где x - канал, t_i - /приближенный/ центр фигуры. Наиболее интересными ситуациями для разрешения мультиплетов без характерных точек, заставляющих предполагать мультиплетную структуру $P_i(x)$, являются:

а/ пара тесно перекрывающихся и приближенно равных по амплитуде пиков;

б/ тесное перекрытие пиков с резко неравными амплитудами.

В случае а/ в качестве основания для предположения о дублетной структуре может служить значительное превышение приближенно подсчитанной полуширины фигуры $P_i(x)$ над допустимой /определенной, например, из калибровочного спектра/. Дополнительно эта подсчитанная полуширина может служить средством для проверки пика на подлинность, т.к. если она значительно ниже допустимой, то это может указывать на то, что данная фигура является локальным выбросом, но не пиком.

В случае б/ следует использовать информацию о форме линии, т.к. горбы на хвостах пиков можно принять за слабые пики.

Пусть W - полуширина пиков в интервале, а $m(x)$ - модель пика с единичными амплитудой и полушириной. Тогда $m((x-t_i)/W)$ - модель пика с центром в t_i и полушириной, равной W . Обозначим

$$m\left(\frac{x-t_i}{W}\right) = m_i(x).$$

Реальный пик в этом интервале с центром в t_i отличается от $m_i(x)$ только амплитудой. Определив эти амплитуды приближенно /как значения $P_i(t_i)$ /, можно далее построить ожидаемый спектр $\sum A_i m_i(x)$ и неотрицательную разность

$$\tilde{s}(x) = \begin{cases} \sum P_i(x) - A_i m_i(x), & \text{если разность неотрицательна} \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

и далее снова анализировать $\tilde{s}(x)$ с помощью ранее рассмотренной процедуры. Так как полуширина W известна не точно, то более точным представляется мультипликативный подход, состоящий в следующем.

Рассмотрим функцию $\chi_i = ((1 - m_i(x)) / (1 + m_i(x)))^2$.

Составим выражение

$$\chi = \prod_{i=1}^n \chi_i = \prod_{i=1}^n (1 - m_i(x)) / (1 + m_i(x))^2, \quad /5.2/$$

которое равно 0 в центрах t_i и приближенно 1 на достаточном удалении от этих центров. Умножим /5.1/ на /5.2/. Произойдет как бы вычеркивание пиков с центрами t_i .

Если все фигуры $P_i(x)$ были одиночными пиками, произведение будет незначимо отличаться от нуля. Иначе в точках максимума произведения, значимо превышающих аналогичное значение такого

же произведения, в котором /5.2/ подсчитано при значении полуширины, равной $W - \Delta W$, где ΔW - допустимая вариация W , можно предполагать наличие скрытых пиков. Построив для вновь найденных пиков выражение /5.2/ и умножив на него остаток, получим новый остаток, который вновь анализируется на наличие значимых максимумов, и так далее.

Геометрический анализ спектров или участков спектра с невысокой статистикой может обнаружить слишком много пиков из-за деформации их формы. Поэтому в заключение поиска производится проверка расстояний между найденными пиками на статистическую значимость. Пусть P_i и P_{i+1} - положения соседних пиков. Тогда должно выполняться условие /11/:

$$\frac{P_{i+1} - P_i}{W} > \frac{kW}{\sqrt{A_{i+1} + A_i}}, \quad A_i, A_{i+1} \text{ - амплитуды.} \quad /5.3/$$

Иначе разность положений статистически незначима, и мы не в состоянии разделить эти два пика. Поэтому в случае невыполнения /5.3/ производится слияние пиков с положениями P_{i+1} и P_i в один пик с положением P_i , вычисляемым по формуле:

$$P_i = \frac{A_i}{A_i + A_{i+1}} \cdot P_i + \frac{A_{i+1}}{A_i + A_{i+1}} \cdot P_{i+1}.$$

Для спектров или участков спектра с особо малой статистикой производится искусственное увеличение статистики с помощью преобразования:

$$s(i) = s(i) + s(i+1),$$

где $s(i)$ - значение спектра в i -м канале.

§6. ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ И РАЗРЕШЕНИЕ АЛГОРИТМА ПОИСКА

Если площадь обнаруженного пика превосходит в десятки раз статистическую ошибку, такой пик сомнений не вызывает. Но как быть, если это отношение равно, например, 4 или 3, или 2. В большинстве случаев такие цифры считаются явно недостаточными для идентификации пика, но такое суждение не может быть категоричным, ибо часто очень слабые пики /весьма важные при анализе γ -спектров в научных целях/ превосходят уровень шума именно в указанное число раз. Критерий формы при исключительно бедной статистике вообще не работает; но, с другой стороны, пикообразность малой фигуры еще не является доказательством того, что это пик. То же самое относится к разделению исключительно близких линий в мультиплетах. Возникает проблема доверия к результатам работы алгоритма поиска пиков. Некоторые авторы придерживаются мнения, что чем больше алгоритм

обнаружит пиков, тем лучше. В неявной форме не избежали подобного заблуждения даже организаторы соревнования программ обработки γ -спектров^{/12/}. Среди тестовых задач по поиску пиков были такие, где пики нельзя было уверенно идентифицировать ни с помощью статистических критериев, ни критериев формы, хотя, казалось бы, должно быть совершенно ясно, что если в алгоритмах не предусмотрено использования какой-либо иной информации, кроме статистической и геометрической, правильные угадывания программы, реализующей такой алгоритм, могут быть результатом либо случайности, либо недоразумения. В работе^{/12/} приведен пример задачи поиска пика средней сложности. К сожалению, в понятие "средняя сложность" не вкладывается количественный смысл, а термин "статистическая значимость" вообще отсутствует в формулировке условий задачи. Из 192 участников распознали этот пик средней сложности 109. Предположим, что они решали бы вопрос о том, следует ли считать данную фигуру пиком или нет, с помощью подбрасывания монеты. Учитывая то, что все участники имели возможность визуально проанализировать тестовые спектры и что вопрос о каждой фигуре, похожей на пик, решался независимо от других фигур, легко видеть, что с большой вероятностью число участников, правильно ответивших на вопрос, было бы равно примерно 96 ± 7 . Оставляя одно отклонение естественному фактору случайности, можно заключить, что профессиональный опыт и интуиция /все участники были, по-видимому, опытными специалистами в области спектрометрии/, а также сложная математическая и компьютерная техника дали выигрыш всего в одно стандартное отклонение по сравнению с методом слепого угадывания. Немного! В случае сложных задач дело обстояло, по-видимому, еще хуже, и там метод угадывания с помощью монеты имел даже преимущество над математическими методами.

Мы попытались просчитать пример одного из "сложных" пиков /спектр №200, канал 870/ с помощью вышеизложенной методики. Значение критерия /4.1/ для него $\approx 0,6$, т.е. даже для уровня значимости 67% эффект отсутствует. Далее критерий формы не выдерживается: оба плеча статистически равны максимуму. МНК - обработка этого участка /при условии наличия пика/ дала оценку площади 800 ± 1000 ; дополнительно алгоритм проверки на возможность подгонки участка прямой линией показал, что χ^2 такой подгонки меньше, чем $1 + \Delta$, где Δ - допустимое отклонение. Вывод: пика здесь нет. Объяснение подобным курьезам может быть только одно: задача поиска пика при отсутствии априорных сведений о наличии пика в спектре и задача определения чувствительности /или разрешения/ метода поиска при имеющихся априорных сведениях о наличии пика являются разными задачами, которые не могут быть решены в рамках одной процедуры^{/14/}. Так

как чувствительность, очевидно, определяется уровнем и характером шумовых деформаций полезных фигур, то она не может быть установлена раз и навсегда для всех спектров, независимо от особенностей последних.

Подход, использованный в данной работе, состоит в следующем. Были введены коэффициенты s и r для чувствительности и разрешения алгоритма, и все статистические величины, используемые при проверках пиков /или мультиплетов/ на значимость, сравнимость и т.д., умножались на s /или r /. Далее для определения s и r каждый физик индивидуально должен проанализировать тестовые спектры, типичные для класса его данных /желательно брать спектры образцов с известным изотопным составом/ и остановиться на тех значениях s и r , при которых процедура распознает только статистически значимые пики /мультиплеты/ и бракует незначимые. Величины s и r были отнормированы автором так, чтобы при $s=1, r=1$ обеспечивалось хорошее качество поиска для использованных им тестовых спектров, снятых с образцов, содержащих многокомпонентные изотопные смеси.

Примечание. Распознавание "плохого" пика в спектре в работе /12/ было осуществлено при $s=0,33$ /т.е. при резком снижении требований к значимости по сравнению с нормой, т.е. $s=1$ /.

§7. ДОБАВЛЕНИЕ ФОНА ПО КРАЯМ

После опознавания мультиплетов полученная информация о пиковой структуре исходного спектра может быть использована для окончательной разбивки последнего на участки для МНК-анализа. Остается лишь откорректировать границы участков на фон, т.е. прирезать фон по краям участков. Присутствие чистого фона в анализируемом участке обязательно, если мы хотим получить высокое качество МНК-анализа данного участка, т.к. декомпозиция линии регрессии на компоненты, осуществляемая через фиттинг, получается хорошей, если для всех компонент имеются подинтервалы участка регрессии, где эти компоненты представлены в чистом виде /т.е. без наложения на них других компонент/. Поскольку вся область спектра, не вошедшая в интервалы с чистыми пиками, считается фоновой, достаточно увеличить концы пиковых интервалов на $k_1 W, k_r W$, где W - полуширина, k_1, k_r - коэффициенты для левого и правого края /с учетом асимметрии формы пика/. Однако такой алгоритм не всегда может быть применен, т.к. у некоторых интервалов смежные концы могут примыкать друг к другу /разделенные, но близкие друг к другу пики/. В этом случае алгоритм производит слияние интервалов /что вполне соответствует визуально реализуемым методам разбивки спек-

ра на участки/. Слиянию предшествует анализ характера смежности интервалов, и в первую очередь сливаются те, которые обоими границами примыкают к соседним интервалам, а затем - имеющие по одной смежной границе.

§8. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНФОРМАЦИИ ОБ ИЗОТОПНОМ СОСТАВЕ

Эта информация может оказать большую помощь при разметке спектра, а именно при выявлении тесных дублетов и слабых пиков. Более того, очень удобным методом разметки является разметка по списку энергий пиков, представляющих интерес. Последнее важно тем, что позволяет обрабатывать не весь спектр, а только те части его, которые представляют интерес.

Разметка по списку энергий может быть осуществлена так. Сначала делается автоматическая разметка /геометрическая/ интервалов спектра по способу, описанному в предыдущих параграфах. Затем из размеченных интервалов отбираются те, в которые попадают энергии /пересчитанные в каналы с помощью обратной калибровки/ из списка; прочие интервалы отбрасываются. Затем производится уточнение пикового состава интервалов:

а/ если число энергий, попавших в интервал, меньше или равно числу автоматически найденных пиков, то гипотеза о пиковой структуре интервала не меняется;

б/ если это число больше, то для энергий, для которых нет близких пиков, вводятся дополнительные слабые пики; если один пик соответствует паре близких энергий, то он считается дублетом и заменяется на 2 пика.

Разметка по информации об изотопном составе осуществляется следующим образом:

а/ энергии из библиотеки описаний изотопов выписываются, упорядочиваются в список, и с помощью обратной калибровки переводятся в каналы;

б/ производится проверка на наличие главных линий /главной линией изотопа считается линия с наибольшим, с учетом эффективности регистрации, выходом/ в спектре. Если главная линия присутствует, то прочие линии данного изотопа проверяются на статистическую значимость вклада в спектр. Если главная линия отсутствует, все линии данного изотопа вычеркиваются из списка, иначе вычеркиваются только те, которые дают в спектр незначимые вклады. Дополнительно объединяются близкие линии, с незначимым расстоянием друг от друга;

в/ далее разметка по сокращенному списку энергий производится точно так же, как описано выше.

Предварительная геометрическая разметка интервалов необходима во всех случаях, т.к. в интервалы могут попасть как непре-

дусмотренные списком пики, так и пики, не представляющие интереса. Если такие пики не размечены, то это нарушит правильный ход последующей МНК-обработки интервала.

§9. УТОЧНЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПИКОВ ПОСЛЕ МНК-ОБРАБОТКИ

Дополнительное уточнение пикового состава размеченного участка спектра можно сделать после его МНК-обработки. Признаками ошибочной разметки /занижения или завышения числа пиков в интервале/ являются:

- 1/. Большой χ^2 в целом и наличие полос больших значений χ^2 в обработанном интервале.
- 2/. Выход параметра полуширины на нижнюю или верхнюю границу.
- 3/. Выход параметров положений близких пиков на смежные границы.

Распознавание этих признаков позволяет уточнить разметку и повторно проанализировать по МНК данный интервал.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Тестовые спектры, предложенные на Венском соревновании программ^{12/}, представляют собой очень интересный и полезный материал для проверки качества работы программ обработки спектров, но значение их все же является ограниченным. Во-первых, из-за упомянутых ранее конфликтов с математической статистикой; во-вторых, и это более важно, в реальной обработке больший интерес представляет поиск не одиночных пиков, а пиков в условиях их перекрытия. Поэтому для иллюстрации работы метода в данном заключении приведены примеры:

- а/ обработки венских тестовых спектров;
- б/ наиболее интересные места анализа сложных γ -спектров образцов, содержащих многокомпонентную смесь изотопов /рис.5/;
- в/ пример анализа спектра X-лучей /рис.6/.

Обработка венских тестов

Спектр №200 был обработан сначала с $s=1,0$. Были обнаружены пики в каналах 214, 285, 521, 767, 827, 927, 967, 1107, 1188, 1309, 1398, 1467, 1566, 1961 - всего 14 пиков, все истинные. Ложных пиков обнаружено не было. Затем было взято $s=0,50$. Повторный анализ спектра №200 обнаружил дополнительно к перечисленным пики в каналах 119, 353, 632, 1743, 1834, 1899. Всего 20 пиков /из 22/. Помимо этих истинных пиков, было обнаружено

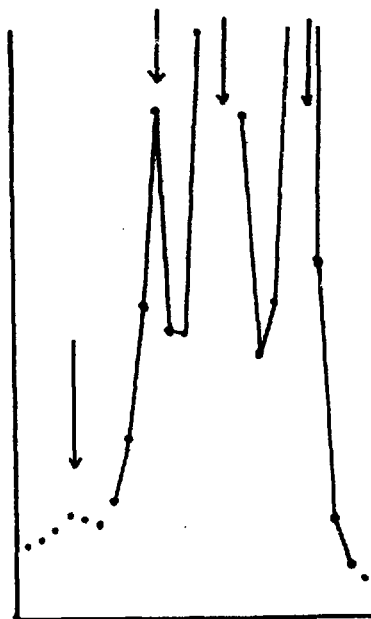


Рис.5. Пример участка γ -спектра. Были найдены 4 пика с площадями: 6100, 60000, 124100, 106800.

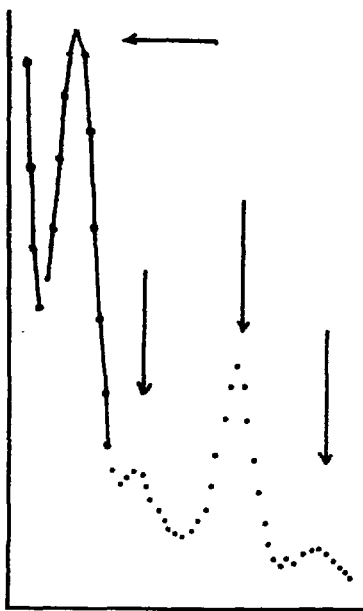


Рис.6. Пример участка спектра X -лучей. Были найдены 4 пика с площадями: 293300, 38500, 108900, 12100.

26 ложных, большая часть которых, однако, была забракована затем процедурами статистического контроля /т.е. без уничтожения самих пиков, а лишь выдачей диагностики об их недостоверности/. Но остались ложные пики в каналах 112, 132, 535, 1481, 1501. Их последующий МНК-анализ дал такие оценки площадей: 544 ± 280 , 595 ± 260 , 717 ± 340 , 103 ± 50 , 156 ± 50 , т.е. незначительные площади с 50% ошибкой. Визуальный анализ спектра №200 не позволяет категорически отвергнуть гипотезы об этих пиках /тем более, что оценки площадей некоторых истинных пиков имеют аналогичный уровень и аналогичные ошибки/, хотя незначительность площадей и высокий уровень ошибки убеждают в их отсутствии. Наконец, был взят уровень $\alpha=0,33$ и спектр №200 был проанализирован в 3-й раз. Были обнаружены недостающие 2 пика: 870 и 1517 /22 из

22! тем самым программа поставила рекорд!/, но помимо этих пиков были обнаружены 89 ложных, из которых статистический контроль забраковал 60 пиков, оставив, однако, пики в каналах: /дополнительно к вышеупомянутым/ 413, 652, 1245, 1266, 1286, 1375, 1443, 1505, 1548, 1583, 1601, 1686, 1696, 1710, 1716, 1766, 1771, 1801, 1848, 1855, 1908, 1916, 1926, 1946 с незначительными площадями /75-100 отсчетов/ и с 50-60% ошибками.

Проверка спектра №200 на соответствие тестам /4.1/, /4.2/, /4.3/ показала, что пики 119, 354, 870, 1745 этим тестам не удовлетворяют даже при очень нестрогих требованиях к достоверности. То, что подходящим оказался не $s=1$, а $s=0,5$, неудивительно. Автором и ранее было замечено, что на тестовых спектрах, полученных программным путем, хорошее значение s , как правило, значительно ниже, чем на реальных γ -спектрах.

Затем метод поиска пиков был применен к спектрам №300 и №400 /хотя условиями соревнования это и не предусматривается/. Анализ спектра №300 велся при $s=1$ и с первой же попытки обнаружил все 22 пика из 22 возможных и 0 ложных пиков, что объясняется большей "физичностью" спектра №300. Анализ спектра №400 велся также при $s=1$, $r=1$ и обнаружил все пики, приняв, однако, сложные дублеты 1033, 1078 и 1118 /где дублетная структура не просматривается даже визуально/, за одиночные линии, но совершенно правильно распознал дублетную структуру линий 986, 1403, 1452, 1789, 1846, 1928. Особенно замечательны случаи линий 986, 1403 и 1452. Здесь даже глаз физика не замечает дублетной структуры. Помимо истинных пиков было обнаружено 7 ложных, из которых контроль забраковал 5 линий, оставив, однако, пики в каналах 302 и 1603 с площадями 523+250 и 160+100 /результаты последующего МНК-анализа, осуществляемого этой же программой/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Routti J.T., Prussin S.G. Nucl.Instr. and Meth., 1969, 72, p.125.
2. Hillman M. Nucl.Instr. and Meth., 1976, 135, p.363.
3. Varnell L., Trischuk J. Nucl.Instr. and Meth., 1969, 76, p.109.
4. Phillips Gary W., Marlow Keith W. Nucl.Instr. and Meth., 1976, 137, p.525.
5. Barnes V. IEEE Trans.Nucl.Sci., 1968, NS-15, 3, p.437.
6. Philipot J.Cl. Nucl.Sci., 1970, NS-17, 3, p.446.
7. Blok H.P., Delange J.L., Schotman J.W. Nucl.Instr. and Meth., 1975, 128, p.545.

8. Winter G., Z.K.Rosendorf, 1969, GAMMA - a Program for Evaluation of Gamma-Ray Spectra. Dresden, s.255.
9. Кабина Л.П., Кондунов И.А. Препринт ЛИЯФ, 123, Л., 1974.
10. Mariscotti M. Nucl.Instr. and Meth., 1967, 50, p.309.
11. Zloказов V.B. Nucl.Instr. and Meth., 1977, 143, p.151.
12. Parr R.M., Houtermans H., Schaerf K. The IAEA Intercomparison of Methods for Processing Ge(Li) Gamma-Ray Spectra. American Nuclear Society Conference on Computers in Activation Analysis and Gamma-Ray Spectroscopy. Mayaguez, Puerto Rico, 1-4 May 1978.
13. Злоказов В.Б. ОИЯИ, Р10-80-510, Дубна, 1980.
14. Козлов В.П. ДАН СССР, 1966, 166, с.779.