快速富里埃变换在解析γ能谱中的应用

钟紅海　　　　张纯祥
（广东省测试分析研究所）（中山大学物理学系）

一、引　言

关于用电子计算机解析、识别$NaI(Tl)$闪烁γ能谱的数据、同位素等方面的理论、程序以及应用等等，早已有大量的文献报导。目前，通常解析γ能谱基本可归纳如下三种方法：(1) 剥谱法[1]：分析的数据不甚精确，很少应用；(2) 响应矩阵法[2]：相当准确，但当γ能谱响应矩阵庞大时，运算极为繁复；(3) 函数拟合法[3]：能精确地描述峰形，但必须引入大量的拟合参数，给函数拟合带来许多实际困难。Cooley等人从数学观点考虑，早已提出了快速富里埃变换(Fast Fourier Transform——简称FFT)算法[4]，使有N^2次运算可减少到$N\log_2 N$次运算。

本文试图将响应能谱看作为一个低频的响应波形，并用富里埃级数来表示标准的响应能谱和观测的能谱，然后用FFT的方法，建立一种求未知γ能谱计算的数学方法。这对于用计算机计算γ能谱的数据，将具有一定的使用价值。

二、响应谱的富里埃级数的数学描述

假设γ能谱仪的道数为N，每个响应谱y_m波形在$(0,N-1)$区间内，而且在等间隔为ϵ的N个点上取样，选择ϵ使截断频率$f_c=\frac{1}{2\epsilon}$充分大。那么响应谱$y(t)$可以用0，$\frac{1}{N}$，$\frac{2}{N}$，……，$\frac{1}{2}H_z$的三角函数的迭合来描述，对$(0,T_p=N\epsilon)$区间内的任意点t可用富里埃级数表示：

$$y(t)=A_0+\sum_{k=1}^{\frac{N}{2}}a_k\cos\frac{2\pi kt}{T_p}+\sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1}b_k\sin\frac{2\pi kt}{T_p} \qquad (1)$$

在点$t_m=m\epsilon$ $(m=0,1,2,\cdots\cdots,\ N-1,\ T_p=m\epsilon)$处有：

$$y_m=y(m\epsilon)=\frac{1}{2}\left(a_0+a_{\frac{N}{2}}\cos\pi m\right)+\sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1}\left(a_k\cos\frac{2\pi km}{N}+b_k\sin\frac{2\pi km}{N}\right) \qquad (2)$$

其中a_k、b_k为富里埃系数：

$$\left.\begin{aligned} a_k &= \frac{2}{N}\sum_{m=0}^{N-1} y_m \cos\frac{2\pi km}{N}, \quad k=0,1,2,\cdots,\ \frac{N}{2} \\ b_k &= \frac{2}{N}\sum_{m=0}^{N-1} y_m \sin\frac{2\pi km}{N}, \quad k=0,1,2,\cdots,\ \frac{N}{2}-1 \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

可见，y_m的N个取样值可由$a_0 \sim a_{\frac{N}{2}}$，$b_1 \sim b_{\frac{N}{2}-1}$的$N$个富里埃系数来描述。

现在进一步研究富里埃级数与富里埃变换之间的关系。我们知道，N个变量的序列$\{Y_k\}$的有限离散富里埃变换：

$$Y_k = \sum_{m=0}^{N-1} y_m \exp(-i\,2\pi km/N) \cong \alpha_k + i\beta_k, \qquad k=0,1,\cdots,\ N-1, \tag{4}$$

其中$i=\sqrt{-1}$，y_m是富里埃系数，且

$$y_m = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} Y_k \exp(i2\pi km/N), \quad m=0,1,\cdots,\ N-1, \tag{5}$$

显而易见，富里埃系数方程(3)的运算对应于富里埃变换方程(4)，富里埃级数(2)对应于富里埃逆变换方程(5)。而且富里埃系数a_k、b_k与频率谱α_k、β_k有如下关系：

$$\left.\begin{aligned} a_k &= \frac{2}{N}\alpha_k,\ b_k = -\frac{2}{N}\beta_k, \quad k=0,1,2,\cdots,\frac{N}{2} \\ a_k &= \frac{2}{N}\alpha_k,\ b_k = \beta_k, \qquad k=\frac{N}{2}+1,\ \frac{N}{2}+2,\cdots,N-1 \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

方程(4)与方程(5)是等价的，可以用以$\exp(-i2\pi km/N)$为元素的矩阵与以y_m为元素的矩阵之积来计算Y_k。这样计算方程(4)需要N^2次运算。当N很大时(即道数很多时，如$N=1024$)，就要耗费大量的计算时间。如果采用以$\exp(-i2\pi km/N)$为元素的矩阵的对称性，即利用FFT的方法，其运算次数可减少到$N\log_2 N$次运算，从而使计算时间大为减少。根据方程(6)的关系，运用FFT运算程序，即能迅速地求出方程(2)的富里埃系数。

从物理观点来看，响应谱可视为以低频成份的基波，其频率谱是高斯分布。因此，方程(2)的富里埃级数的N项中，应尽量除去高频成份，以最少的参数求出响应谱，进行数据简化。对于计算的响应谱，其有限离散的富里埃级数：

$$\hat{y}_m = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{L-1}\left(a_k \cos\frac{2\pi km}{N} + b_k \sin\frac{2\pi km}{N}\right) \tag{7}$$

其中$L \leqslant \frac{N}{2}+1$——为所求的必需项数，它可以通过下面的拟合误差(即平方中值误差)J_L求出：

$$J_L^2 = \frac{1}{N}\sum_{m=0}^{N-1}(y_m - \hat{y}_m)^2 \tag{8}$$

将方程(2)和方程(7)代入方程(8)，使J_L的系数$a_k(k=0,1,2,\cdots,L-1)$和$b_k(k=1,$

2，…，$L-1$)最小，拟合误差J_L可表示为：

$$J_L^2 = \frac{1}{2}\left\{ \sum_{k=L}^{\frac{N}{2}-1} (a_k^2 + b_k^2) + a_{\frac{N}{2}}^2 \right\} \qquad (9)$$

这是y_m频率为$\frac{L}{N}\sim\frac{1}{2}H_z$的功率谱。如果$L=\frac{N}{2}+2$，方程(7)与方程(2)完全相等，此时，拟合误差$J_L=0$。用$FFT$求出功率谱密度分布，使$J_L$值最小，即可求出适当的项数$L$。

三、简化γ能谱计算的数学理论

假设有一个$0\sim N-1$道的脉冲高度谱，它是由p种已知单能γ射线所组成，或由p种已知γ放射性核所组成。若以m表示道序数；n表示同位素号序；脉冲高度谱(观测谱)m道的计数率为b_m；对p种能量的γ射线的标准响应谱，第n个同位素对第m道的计数率为y_{nm}，即y_{nm}表示第n个标准响应谱；x_n为n种同位素相对于标准源的强度。那么，观测谱与标准响应谱之间的关系：

$$b_m = \sum_{n=1}^{p} x_n y_{nm} + \delta_m, \quad m = 0,1,2,\cdots\cdots N-1, \qquad (10)$$

其中δ_m为m道计数率的统计误差。

根据第二节所述，可将第n个计算的响应谱$\hat{y}_{nm}$用有限离散富里埃级数表示：

$$\hat{y}_{nm} = \frac{1}{2}a_{n0} + \sum_{k=1}^{L-1}\left(a_{nk}\cos\frac{2\pi km}{N} + b_{nk}\sin\frac{2\pi km}{N}\right) \qquad (11)$$

观测谱的准确性可用拟合误差$J(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \cdots, \hat{x}_p)$来估计，它可表示为：

$$J^2(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \cdots \hat{x}_p) = \frac{1}{N}\sum_{m=0}^{N-1}\left\{ b_m - \sum_{n=1}^{p}\hat{x}_n \hat{y}_{nm} \right\}^2 \qquad (12)$$

就是说，$J(\hat{x}, \hat{x}_2\cdots\cdots\hat{x}_p)$是各个误差的平方算术平均值的平方根。其物理意义是：衡量方程(11)对于观测谱的近似程度。

如果将方程(11)代入方程(12)，即得：

$$J^2(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \cdots\cdots \hat{x}_p) = \frac{1}{N}\sum_{m=0}^{N-1}\left\{ b_m - \frac{1}{2}(\hat{x}_1 a_{10} + \hat{x}_2 a_{20} + \cdots + \hat{x}_p a_{p0}) - \right.$$

$$-\sum_{k=1}^{L-1}\left[(\hat{x}_1 a_{1k} + \hat{x}_2 a_{2k} + \cdots + \hat{x}_p a_{pk})\cdot\cos\frac{2\pi km}{N} + \right.$$

$$\left.\left. + (\hat{x}_1 b_{1k} + \hat{x}_2 b_{2k} + \cdots + \hat{x}_p b_{pk})\cdot\sin\frac{2\pi km}{N}\right]\right\}^2 \qquad (13)$$

显然，用观测谱和各响应谱的数据，求未知强度的值$\hat{x}_1$，$\hat{x}_2$，…$\hat{x}_p$的问题，可归结为求函数$J^2(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \cdots, \hat{x}_p)$的最小值的问题。它应满足：

$$\frac{\partial J^2(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \cdots, \hat{x}_p)}{\partial \hat{x}_n} = 0, \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots, p) \tag{14}$$

或：

$$\sum_{k=0}^{L-1} a_{nk}(\hat{x}_1 a_{1k} + \hat{x}_2 a_{2k} + \cdots + \hat{x}_p a_{pk}) + \sum_{k=1}^{L-1} b_{nk}(\hat{x}_1 b_{1k} + \hat{x}_2 b_{2k} + \cdots + \hat{x}_p b_{pk})$$

$$= \sum_{k=0}^{L-1} a_{nk}\alpha_k + \sum_{k=1}^{L-1} b_{nk}\beta_k \tag{15}$$

其中α_k，β_k是各观测谱b_m的富里埃系数：

$$\left.\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{2}{N}\sum_{m=0}^{N-1} b_m \cos\frac{2\pi km}{N}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots, L-1. \\ \beta_k &= \frac{2}{N}\sum_{m=0}^{N-1} b_m \sin\frac{2\pi km}{N}, \quad k = 1, 2, \cdots, L-1, \end{aligned}\right\} \tag{16}$$

P个联立方程组(14)可写成矩阵形式：

$$\underset{(2L-1)\times p}{\Phi^T} \cdot \underset{p\times(2L-1)}{\Phi} \cdot \underset{p\times 1}{\hat{X}} = \underset{(2L-1)\times p}{\Phi^T} \cdot \underset{(2L-1)\times 1}{\Psi} \tag{17}$$

其中Φ^T为Φ的转置矩阵；Φ为响应矩阵(由响应谱的富里埃系数所组成的矩阵)；Ψ为观测谱的富里埃系数所组成的矩阵；$\hat{X}$为计算的未知谱强度。其矩阵形式分别为：

$$\Phi \cong \begin{pmatrix} a_{10} & a_{20} \cdots\cdots & a_{p0} \\ a_{11} & a_{21} \cdots\cdots & a_{p1} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{1(L-1)} & a_{2(L-1)} & a_{b(L-1)} \\ b_{11} & b_{21} \cdots\cdots & b_{p1} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ b_{1(L-1)} & b_{2(L-1)} \cdots & b_{p(L-1)} \end{pmatrix}, \quad \Psi \cong \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{L-1} \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{L-1} \end{pmatrix}, \quad \hat{X} \cong \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix}$$

令$\Phi^T \cdot \Phi = U$，$\Phi^T \cdot \Psi = V$，于是，可以简单地给出方程(17)的解：

$$\underset{p\times 1}{\hat{X}} = \underset{(2L-1)\times(2L-1)}{U^{-1}} \cdot \underset{(2L-1)\times 1}{V} \tag{18}$$

其中U^{-1}为U的逆矩阵。

由此可知，用各响应谱的富里埃系数所组成的矩阵与观测谱的富里埃系数所组成的矩阵之间的运算，即可求出未知谱$\hat{X}$的值。方程(18)在形式上与响应矩阵法求未知谱是相似的[6]。但是在响应矩阵法中，响应谱矩阵为$N\times P$阶，观测谱矩阵为$N\times 1$阶；而在FFT中，响应谱的矩阵为$(2L-1)\times p$阶，观测谱矩阵为$(2L-1)\times 1$阶。因此，可得出这样的结论：用富里埃级数表示的响应谱，通过FFT方法，可使运算次数大大减少，从而节约了大量的计算时间。这将是很有价值的一种新的计算方法。

四、误差讨论

根据第二节所述，0～$N-1$道的观测谱，可用频率为0，$\frac{1}{N}$，$\frac{2}{N}$，…，$\frac{1}{2}H_z$的富里埃级数来描述：

$$b_m=\frac{1}{2}(\alpha_0+\alpha_{\frac{N}{2}}\cos\pi m)+\sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1}(\alpha_k\cos\frac{2\pi km}{N}+\beta_k\sin\frac{2\pi km}{N}) \tag{19}$$

$$(m=0,1,2,\cdots\cdots,N-1)$$

富里埃系数$\alpha_0,\alpha_1,\cdots,\alpha_{\frac{N}{2}},\beta_1,\cdots\beta_2\beta,_{\frac{N}{2}-1}$　可由FFT程序算出。它只需计算观测谱数据中的α_0，α_1，α_2，…，α_{L-1}，β_1，β_2，…，β_{L-1}的$2L$～1个系数的参数。其拟合误差可表示为：

$$J^2(\hat{x}_1,\hat{x}_2,\cdots,\hat{x}_p)=\frac{1}{N}\sum_{m=0}^{N-1}(b_m-\sum_{n=1}^{p}\hat{x}_n\hat{y}_{nm})^2 \tag{20}$$

将方程(11)和(19)代入方程(20)，即得：

$$J^2(\hat{x}_1,\hat{x}_2,\cdots\hat{x}_p)=R(\hat{x}_1,\hat{x}_2,\cdots\hat{x}_p)+\frac{1}{2}\left\{\alpha^2_{\frac{N}{2}}+\sum_{K=L}^{\frac{N}{2}-1}(\alpha_k^2+\beta_k^2)\right\} \tag{21}$$

其中 $R(\hat{x}_1,\hat{x}_2,\cdots\hat{x}_p)=\frac{1}{2}\{(\alpha_0-\hat{x}_1a_{10}-\hat{x}_2a_{20}-\cdots-\hat{x}_pa_{p0})^2+$

$$+\sum_{k=1}^{L-1}[(\alpha_k-\hat{x}_1a_{1k}-\hat{x}_2a_{2k}-\cdots-\hat{x}_pa_{pk})^2+$$

$$+(\beta_k+\hat{x}_1b_{1k}-\hat{x}_2b_{2k}-\cdots-\hat{x}_pa_{pk})^2]\}.$$

因此，方程(21)的物理意义是很显然的，方程式右边的第一项为计算值$\hat{x}_1$，$\hat{x}_2$，…$\hat{x}_p$的计算精度误差；第二项为观测谱频率从$\frac{1}{N}$～$\frac{1}{2}H_z$的功率谱。

五、结　　论

本文将响应能谱展开成富里埃级数，进而研究了用FFT方法，建立了一种简化γ能谱数据处理的计算新方法。它既能满足误差要求，又能减少数据处理的计算过程。从理论上计算，计算时间能节约40%以上。此法数学原理简单，容易编程序。对于处理$N_aI(T\ell)$闪烁γ能谱数据将是有用的。

参考文献

〔1〕M. P. Menon et al., *Anal. Chin. Acta*, 38(1967), 349.
〔2〕朱荣保等，原子能科学技术，1975, 4, 302.
〔3〕P. T. M. Korthiver, *I. R. I. Report*, 133-70-04.
〔4〕J. W. Cooley et al., *Mathematic of Compuation*, 19(1965), 90, 297.
〔5〕C. E. Crouthamel et al., *Applied gamma-ray spectrometry*, New York, 1970.

Application of the Fast Fourier Transform to the Gamma-ray Spectra Analysis

Zhong Honghai *Zhang Chunxiang*

Abstract

The mathematical method by using the Fast Fourier Transform for processing the data of the γ-ray spectra has been discussed. It can not only simplify the data processing in the calculation of the response matrix of γ-ray spectra, but also be used to do data analysis with the computer. Besides, the fitting discrepancy in this method is also discussed.