高速フーリエ変換を用いた γ 線スペクトルの解析

富永昌治, 永田昭次郎*, 納谷嘉信*, 上田 勇*, 佐々木 崇*

大阪電気通信大学工学部 572 寝屋川市初町18-8

*電子技術総合研究所大阪支所 661 尼崎市若王寺

1977年7月18日受理

γ 線スペクトルのレスポンス行列法における大量データ処理の簡便化を目的として、高速フーリエ変換を用いた解析法を述べた。さらにその方法のNaI検出器によるスペクトルに対する適用例を示した。これは、応答スペクトルを有限フーリエ級数で表現することにより、スペクトル情報のデータ要約が可能であることを利用したものである。 γ 線エネルギーの強度推定は、標準の応答スペクトルと観測スペクトルの要約されたデータを用いる簡単な行列演算で行うことができる。また γ 線エネルギー成分の同定も比較的容易に計算することができる。さらに本方式のもついくつかの特徴と今後の問題点についても述べた。

1. 序 論

前報¹⁾において、NaI検出器の標準の応答スペクトル（エネルギー既知の単一 γ 線に対するNaIの応答スペクトル）をピーク部分およびコンプトン散乱部分を総合的に対象として、フーリエ級数で表現することにより、スペクトルデータのかなりの要約が可能であることを示した。このとき、適合されたフーリエ級数で得られたパラメータ（フーリエ係数）は元の標準応答スペクトルの各波形を位置の情報とともに保存する。しかも級数は直交関数系としての望ましい性質を保有している。

さて、NaI検出器による各種 γ 線場に関する観測データにもとづいて、 γ 線スペクトルの組成の定量分析には、レスポンス行列法^{2),3)}が、信頼できる標準スペクトルを用いるならば、最も確実な解析法と考えられている。しかし、これが波高分析器の全チャンネルにおける標準スペクトルを多次元観測ベクトルとして使用することを考慮するならば、レスポンス行列がかなり大きくなり、計算処理は膨大なデータの行列演算を実行する必要がある。この点については前報¹⁾序論において詳述した。

本論文ではレスポンス行列法におけるこの欠点を補うことを目的とする。レスポンス行列法は、各種 γ 線源で構成される γ 線場の観測スペクトルが各標準の応答スペクトルの線形結合で表されることを前提とする。このさい、観測スペクトルと各標準スペクトルのそれぞれを、前報の方法でフーリエ級数で表現する。これにより γ 線の組成の推定は、観測スペクトルのフーリエ・パラメータと各標準スペクトルのフーリエ・パラメータのみを用いる簡単な行列演算に帰することができる。

本論文では、まず高速フーリエ変換(FFT)を用いた γ 線スペクトルの組成推定法の理論を明らかにする。ついでその理論をNaI検出器による応答スペクトルライブラリに適用してシミュレーションを行い、本方式の妥当性を検討するとともにいくつかの特徴を示す。

2. 推定方式の理論

波高分析器のチャンネル数を N とし、全チャンネルの観測スペクトルから組成を推定する場合について考察する。また数式表現のつごうにより、チャンネルには0から $N-1$ チャンネルと1チャンネルずらして番号を付け直すことにする。いま、 M 種類の入射 γ 線エネルギーに対する標準応答スペクトル^{*}があり、 i 番目のエネルギー成分からの j チャンネルに寄与するカウント数を h_{ij} とする。すなわち $h_{ij}(j=0, 1, \dots, N-1)$ は i 番目の標準応答スペクトルを表す。その強度を x_i で示し、これが推定すべき未知量である。観測スペクトルと各応答スペクトルの強度との間には線形性が成立するため、波高分析器の j チャンネルの計数値 C_j は

$$C_j = \sum_{i=1}^M x_i h_{ij} + n_j \quad (j=0, 1, \dots, N-1) \quad (1)$$

と記述できる。ここで、 n_j は j チャンネルの計数誤差である。さて、 i 番目の応答スペクトルに有限フーリエ

*線源からの放射光子数で基準化した応答スペクトルをここでは標準応答スペクトルとして取り扱う。

級数を適合して

$$h_{ij} = \frac{1}{2}a_{i0} + \sum_{k=1}^{L-1} \left(a_{ik} \cos \frac{2\pi k j}{N} + b_{ik} \sin \frac{2\pi k j}{N} \right) \quad (2)$$

と表現されるものとする¹⁾。ただし $L (\leq N/2)$ は適合に必要な項数であり、簡単のためにすべての応答スペクトルに対して一定であるとする。すなわち、各応答スペクトルは周波数 $0 \sim (L-1)/N$ Hz 間の正(余)弦波で記述できると仮定する。推定理論上から、 L は未知パラメータ数 M よりも大である必要がある。

観測スペクトルと各応答スペクトルの情報を用いて強度の推定値 $\hat{x}_1 \sim \hat{x}_M$ を求めるために、つぎのような2乗平均誤差を評価関数として採用する。

$$J(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \left(C_j - \sum_{i=1}^M \hat{x}_i h_{ij} \right)^2 \quad (3)$$

ここで(2)式を(3)式に代入すれば、結局次式を最小にする推定値 $\hat{x}_i$ を求める問題となる。

$$\begin{aligned} J(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M) = & \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \left[C_j - \frac{1}{2}(\hat{x}_1 a_{10} + \dots \right. \\ & \left. + \hat{x}_M a_{M0}) \right. \\ & \left. - \sum_{k=1}^{L-1} \left\{ (\hat{x}_1 a_{1k} + \dots + \hat{x}_M a_{Mk}) \cos \frac{2\pi k j}{N} \right. \right. \\ & \left. \left. + (\hat{x}_1 b_{1k} + \dots + \hat{x}_M b_{Mk}) \sin \frac{2\pi k j}{N} \right\} \right]^2 \quad (4) \end{aligned}$$

したがって上式について $\partial J / \partial \hat{x}_i = 0$ ($i=1, \dots, M$) を計算し、フーリエ級数の直交性に注意して整理すれば、 M 個の連立方程式

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{L-1} a_{ik} (\hat{x}_1 a_{1k} + \dots + \hat{x}_M a_{Mk}) \\ & + \sum_{k=1}^{L-1} b_{ik} (\hat{x}_1 b_{1k} + \dots + \hat{x}_M b_{Mk}) \\ & = \sum_{k=0}^{L-1} a_{ik} \left(\frac{2}{N} \sum_{j=0}^{N-1} C_j \cos \frac{2\pi k j}{N} \right) \\ & + \sum_{k=1}^{L-1} b_{ik} \left(\frac{2}{N} \sum_{j=0}^{N-1} C_j \sin \frac{2\pi k j}{N} \right) \quad (5) \end{aligned}$$

が得られる。上式の右辺の括弧内はそれぞれが観測スペクトル C_j ($j=0, \dots, N-1$) のフーリエ係数であることに着目する。そして

$$\left. \begin{aligned} \alpha_k & \triangleq \frac{2}{N} \sum_{j=0}^{N-1} C_j \cos \frac{2\pi k j}{N} \quad (k=0, 1, \dots, L-1) \\ \beta_k & \triangleq \frac{2}{N} \sum_{j=0}^{N-1} C_j \sin \frac{2\pi k j}{N} \quad (k=1, \dots, L-1) \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

とおく。記述の簡単のため、(5)式を行列を用いて表現すれば、

$$\mathbf{H}^T \mathbf{H} \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{H}^T \mathbf{C} \quad (7)$$

を得る。ここで T は行列の転置を表す。また $\mathbf{H}$ は応答スペクトルのフーリエ係数からなる行列 (レスポンス

行列)、 $\mathbf{C}$ は観測スペクトルのフーリエ係数の行列 (ベクトル)、および $\hat{\mathbf{x}}$ は推定値のベクトルであり、それぞれはつぎのような形をとる。

$$\mathbf{H} \triangleq \begin{bmatrix} a_{10} & \dots & a_{M0} \\ a_{11} & & a_{M1} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{1(L-1)} & \dots & a_{M(L-1)} \\ b_{11} & \dots & b_{M1} \\ \vdots & & \vdots \\ b_{1(L-1)} & \dots & b_{M(L-1)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} \triangleq \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{L-1} \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{L-1} \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{x}} \triangleq \begin{bmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \vdots \\ \hat{x}_M \end{bmatrix} \quad (8)$$

このようにして、推定値 $\hat{\mathbf{x}}$ は

$$\hat{\mathbf{x}} = [\mathbf{H}^T \mathbf{H}]^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{C} \quad (9)$$

から計算できることがわかる。上式は、各応答スペクトルのフーリエ係数と観測スペクトルのフーリエ係数との行列演算で推定値が得られることを示している。また(9)式はレスポンス行列法によるこれまでの推定方式の一般式と形の上で一致する。しかしレスポンス行列法ではレスポンス行列 $\mathbf{H}$ の大きさは $N \times M$ であり、また観測スペクトルの行列 $\mathbf{C}$ は $N \times 1$ である。一方本方式では、 $\mathbf{H}$ は $(2L-1) \times M$ 、 $\mathbf{C}$ は $(2L-1) \times 1$ に減少している。すなわち応答スペクトルが L の小さいフーリエ級数で表現できる場合には、推定の演算回数を大幅に減少させることができる。

3. 誤差の解析と推定の手順

標準化定理より、 N チャネルの計数値で表される観測スペクトルは周波数 $0, 1/N, 2/N, \dots, 1/2$ Hz からなるフーリエ級数で一意に表現できる¹⁾。すなわち

$$\begin{aligned} C_j = & \frac{1}{2}(\alpha_0 + \alpha_{N/2} \cos \pi j) \\ & + \sum_{k=1}^{N/2-1} \left(\alpha_k \cos \frac{2\pi k j}{N} + \beta_k \sin \frac{2\pi k j}{N} \right) \\ & (j=0, 1, \dots, N-1) \quad (10) \end{aligned}$$

フーリエ係数の各パラメータ $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{N/2}, \beta_1, \dots, \beta_{N/2-1}$ は FFT プログラムを用いて得られる。しかし前節において、標準応答スペクトルに関する(2)式の仮定のもとでは、組成の推定計算に必要な観測スペクトルの情報はこのうち $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{L-1}, \beta_1, \dots, \beta_{L-1}$ の $2L-1$ 個の係数パラメータのみであることが明らかとなった。さて、このときの評価関数 $J(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M)$ の値は具体的につぎのように記述できる (付録参照)。

$$\begin{aligned} J(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M) = & Q(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M) \\ & + \frac{1}{2} \left\{ \alpha_{N/2}^2 + \sum_{k=L}^{N/2-1} (\alpha_k^2 + \beta_k^2) \right\} \quad (11) \end{aligned}$$

ただし、

$$(10)$$

$$Q(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M) = 1/2 \|C - H\hat{x}\|^2 \quad (12)$$

また記号 $\|\cdot\|$ は $\|v\| \triangleq v^T v$ と定義する。(11)式の右辺第1項は推定値 $\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M$ の推定精度に関する誤差である。また第2項は観測スペクトル波形の周波数 $L/N \sim 1/2$ Hz までのパワ・スペクトルであり、推定のための観測スペクトルの情報として不必要であった成分がここに残っている。通常、観測スペクトル中の計数誤差等の雑音成分は比較的高い周波数領域に多く含まれると考えられる⁴⁾。したがって本手法では、そのような周波数成分をあらかじめ取り除いて推定計算の能率を上げていることになる。

一般にレスポンス行列法では、あらかじめ γ 線エネルギー成分の種類がわかっていない場合には大きな誤差を伴う。このような場合、いくつかの標準スペクトルについて組み合わせを作り、そのつど推定の残差からエネルギー成分を同定するのが確実な方法である。上に述べたことから明かなように、ここでは得られた推定値から $J(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M)$ を計算する必要はなく、 $Q(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M)$ を求めて、この値が小さくなる組み合わせを採用すればよいことになる。

さて γ 線スペクトル組成の推定を実行するための計算手順を簡単に述べると以下ようになる。1) あらかじめ標準の応答スペクトルのフーリエ係数を求めておく。2) 観測スペクトルからFFTを用いてそのフーリエ係数を得る((6)式)。3) (9)式から各エネルギーの強度の推定値 $\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M$ を計算する。4) 標準スペクトルの他の組み合わせについて推定値を求めて、 $Q(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M)$ の比較をする。

4. シミュレーションの実施

以下に示すシミュレーションでは分析対象の γ 線スペクトルとして、Heathら³⁾が作成した13種類の単色 γ 線源に対するNaI検出器の応答スペクトルライブラリを用いる(前報¹⁾ Fig. 1 参照)。まず、 γ 線エネルギーの構成成分を9種類、そしてその強度をすべて1として、9種類の応答スペクトル①③④⑤⑦⑧⑩⑫⑬を重ねた分布

$$d_j = h_{1j} + h_{3j} + \dots + h_{13j} \\ (j=0, \dots, 127) \quad (13)$$

を作成する。

γ 線測定においては、各チャンネルの計数値はPoisson分布に従い、しかもたがいに独立である。一般に平均値が大きく

なれば、Poisson分布は正規分布で十分近似できることが知られている。したがって乱数発生を簡単にするために、分布 d_j に対してつぎのような計数誤差を付加することにした。すなわち、(1)式から計数値は

$$C_j = d_j + n_j \quad (j=0, \dots, 127) \quad (14)$$

と表されるが、 n_j として平均0、分散 d_j となる独立な正規乱数を用いる。このとき C_j は平均と分散がともに d_j となる正規分布に従い、Poisson分布の条件は近似的に満足されることになる。このようにして得られた観測スペクトルをFig. 1に示す。成分③④⑤と⑩⑬はそれぞれエネルギー近接しており、また付加誤差のためにピークを明確に区別できない状況にある。

さて、すでに筆者らは前報において、各応答スペクトルはフーリエ級数35項($L=35$)で十分表現しうることを見事に示した¹⁾。そして13種類のスペクトルについて、おのおの69個のフーリエ係数から成るスペクトルライブラリを得ている。ここではこのライブラリ情報を用いることにする。

前節の手順に従って、まずFFTを用いて観測スペクトルのフーリエ級数を求め、 C を得た。つぎにエネルギー成分の強度推定においては、つぎの3通りの場合を想定してそれぞれ推定計算を行った。(1)エネルギー成分の種類が未知であるとして、ライブラリスペクトルをすべて用いた場合、(2)成分が正確に同定できた場合、(3)ピークの位置が明確でないために、成分の同定を誤った場合。まず(1)の場合について、(9)式から得られた13種類の推定値と誤差 Q をTable 1に示す。また計数値に対する残差 $e_j (j=0, \dots, 127)$ (付録(A・1)式)をFig. 1に示す。観測スペクトルに含まれる9種類のエネルギー成分については、真値1に近い推定値

Fig. 1 Observation spectrum used for simulation. (Each intensity of nine components is 1.)

Table 1 Results of the estimation of Case 1.
(All the library spectra are used.)

Components	Estimated intensities
1	1.020
2	0.019
3	1.077
4	1.112
5	1.019
6	0.004
7	0.990
8	1.015
9	-0.015
10	1.035
11	-0.004
12	0.973
13	1.087
Error Q	37.05

Table 2 Results of the estimation of Case 2.
(Existing components are known.)

Components	Estimated intensities
1	1.021
3	1.097
4	1.111
5	1.019
7	0.993
8	1.017
10	1.037
12	0.973
13	1.086
Error Q	38.24

Table 3 Results of the estimation of Case 3.
(One component is missed to use.)

Components	Estimated intensities
1	1.027
3	1.088
4	1.114
5	1.035
7	1.024
8	1.059
10	1.177
13	1.685
Error Q	138.47

が得られている。またその他の成分についても真値 0 に近い、十分小さい値が得られる。とくに非常に小さい値であるが、負の推定値が得られているが、このような成分はスペクトルに含まれていないものとして、組成から取り除くべきものである。つぎに(2)の場合の結果を Table 2 に示す。(1)と同程度の Q の値でもって、より真値に近い推定値が得られている。最後に(3)の場合については、成分⑫と⑬が区別できないものとして、⑫を除いた残り 8 種類の成分のみについて推定を行った。結果を Table 3 に示す。⑫を除いた影響が⑬の推定値の悪さに現れている。また誤差 Q は他の 2 つの場合に比べて非常に大きく、エネルギー成分の同定に誤りがあることがはっきり認められる。

5. 結 論

本論文では、 γ 線スペクトル解析のレスポンス行列法における大量データ処理の簡便化を目的として、FFTを用いた新しい解析法を述べ、NaI検出器によるスペクトルについてその有用性を例示した。また本手法を用いれば、エネルギー成分を同定することも容易であることが明らかになった。また本手法には、標準応答スペクトルへの適合が完全でなくても、フーリエ級数で応答スペクトルの波形としての特徴を十分抽出すれば、精度よく組成に関する推定値が得られる利点がある。

本論文で述べたように、分解能のよくない検出器による γ 線スペクトル解析には既知アイソトープによるスペクトルライブラリの利用が最も効果的であるが、これには多くの標準スペクトルが必要である。標準スペクトルの作成について、筆者らは、得られている標準スペクトル間の相関を利用して、補間により新しい標準スペクトルを求める手法を考案した⁵⁾。これに関しては別の機会に報告する予定である。

適用例における処理計算はミニコン MELCOM70/20を用いて行った。

最後に有益なご助言をいただいた電総研大阪支所横田室長に深謝する。

文 献

- 1) 富永昌治, 他: *Radioisotopes*, **26**, 835 (1977)
- 2) Blackburn, J.A.: *Anal. Chem.*, **37**, 1000 (1965)
- 3) Heath, R.L.: *Nucl. Instr. Methods*, **43**, 209 (1966)
- 4) 日本物理学会編: “計算機による物理実験デー

- タ処理”, 100, サイエンス社 (1973)
 5) 富永昌治, 他: 第24回応物連合予稿集, 1, 201 (1977)

付 録

(11)式の導出

計数値に対する残差

$$e_j \triangleq C_j - \sum_{i=1}^M \hat{x}_i h_{ij} \quad (j=0, \dots, N-1) \quad (\text{A} \cdot 1)$$

を調べる。上式に(10)式と(2)式を代入して整理すれば

$$e_j = \left[\frac{1}{2} \{ \alpha_0 - \hat{x}_1 a_{10} - \dots - \hat{x}_M a_{M0} \} \right. \\ \left. + \sum_{k=1}^{L-1} \left\{ (\alpha_k - \hat{x}_1 a_{1k} - \dots - \hat{x}_M a_{Mk}) \cos \frac{2\pi k j}{N} \right. \right. \\ \left. \left. + (\beta_k - \hat{x}_1 b_{1k} - \dots - \hat{x}_M b_{Mk}) \sin \frac{2\pi k j}{N} \right\} \right]$$

$$+ \left[\frac{1}{2} \alpha_{N/2} \cos \pi j + \sum_{k=L}^{N/2-1} \left(\alpha_k \cos \frac{2\pi k j}{N} \right. \right. \\ \left. \left. + \beta_k \sin \frac{2\pi k j}{N} \right) \right] \quad (\text{A} \cdot 2)$$

を得る。評価関数 $J(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M)$ の値はフーリエ級数の直交性を利用すれば, つぎのように求まる。

$$J(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} e_j^2 \\ = \frac{1}{2} \left[(\alpha_0 - \hat{x}_1 a_{10} - \dots - \hat{x}_M a_{M0})^2 \right. \\ \left. + \sum_{j=1}^{L-1} \{ (\alpha_k - \hat{x}_1 a_{1k} - \dots - \hat{x}_M a_{Mk})^2 \right. \\ \left. + (\beta_k - \hat{x}_1 b_{1k} - \dots - \hat{x}_M b_{Mk})^2 \} \right] \\ + \frac{1}{2} \left[\alpha_{N/2}^2 + \sum_{k=L}^{N/2-1} (\alpha_k^2 + \beta_k^2) \right] \quad (\text{A} \cdot 3)$$

ここで(8)式で定義した行列を用いて上式の表現を簡略化すれば(11)式を得る。

Abstract

Analysis of γ -Ray Spectra by Using Fast Fourier Transform

Shoji TOMINAGA, Shojiro NAGATA*, Yoshinobu NAYATANI*,
 Isamu UEDA*, Satoshi SASAKI*

Faculty of Engineering, Osaka Electro-Communication University
 Neyagawa-shi, Osaka 572

*Osaka Branch, Electrotechnical Laboratory
 Wakaoji, Amagasaki-shi 661

In order to simplify the mass data processing in a response matrix method for γ -ray spectral analysis, a method using a Fast Fourier Transform devised. The validity of the method was confirmed by a computer simulation for spectra of a NaI detector. The method uses the fact that spectral data can be represented by Fourier series with reduced number of terms. The estimation of intensities of γ -ray components is performed by a matrix operation using the compressed data of an observation spectrum and standard spectra in Fourier coefficients. The identification of γ -ray energies is also easy. Several features in the method and a general problem to be solved in a response matrix method are described.

(Received July 18, 1977)