特異値分解を用いた曲線応答解析と その放射線スペクトルへの適用[†]

富 永 昌 治*・納 谷 嘉 信**・永 田 昭次郎**

Analysis of Response Curves Using Singular-Value
Decomposition and Its Application to Radiation Spectra

Shoji TOMINAGA*, Yoshinobu NAYATANI** and Shojiro NAGATA**

The responses of measurement systems are often observed as curves. In this paper, a singular-value decomposition technique is applied to the following three problems in the analysis of response curves: (1) extraction of components or features, (2) effective representation of curves, (3) estimation of unknown curves. The analysis is based on that a response curve can be decomposed to become a linear combination of basic-component patterns, and the predominant members of these patterns provide a good approximate representation of the original response curve. The complicated estimation problem of interpolating the curves, then, can be reduced to a simple interpolation of weighting coefficients needed to combine the component patterns.

Next, the proposed method is applied to the measured curves of γ -ray response spectra. The results show that the curves of response spectra can be represented by utilizing only two principal-component patterns. Moreover, we discuss about the accuracy of the estimated spectral curves and the improved method, and illustrate the goodness of the interpolated results.

1. は じ め に

計測系においては、その応答が曲線として観測されることが近年増大しつつある。曲線データの解析には、幅広い多くの問題が含まれるけれども、その解析

目的は、(1)成分、特徴の抽出、(2)曲線の能率のよい表現、(3)未知曲線の推定、のほぼ三つに分類することができる。(1)には、単に曲線の形状から定性的な情報を推測するにとどまらず、曲線データの中から構成成分、特徴などを抽出したり、それらを物理量と対応づけたり、成分間の関係を調べたりする問題が含まれる。(2)は曲線の近似表現の問題である。大量の曲線データを圧縮(簡略化)し、それらの簡略化されたデータを用いて曲線を能率よく表現することは、記憶容量の節約とともに、処理・表示の迅速化をもたらすことになる。(3)は実験系においてしばしば起こる問題であり、実験の制約から任意の条件における応答データをすべて実測することは困難な場合がある。この時、得られている応答曲線群をもとにして補間を行い、希望する条件における応答曲線を推定することが必要となる。

(1)と(2)については、パターン認識や信号処理の分野で多くの手法が開発されている¹⁾。また(3)を指向する解析法として、実測された応答曲線に適当な関数形をあてはめてモデル化する方式の適用が考えられる²⁾。しかし、(1)~(3)の目的に適した解析法の統一した議論はこれまでほとんどなされていない。

本論文では、まず一般応答曲線の解析に対して特異値分解^{3),4)}の使用を提案し、上記の3項目にそって方法の原理を明らかにする。この方法は、応答曲線群を一つの行列で離散的に表現し、この行列を特異値分解することによって、各応答曲線は共通の基本成分パターンの線形結合として分解できることに基いている。すなわち、与えられたデータから曲線群を特徴付ける固有の成分を抽出することができ、またそのうちから寄与の大きい成分をいくつか選択することによって、応答曲線の能率のよい近似表現が期待できる。さらに複雑な曲線補間の問題を、成分パターンを合成す

[†] 情報処理学会第18回全国大会で発表(昭52・10)

第24回応用物理学関係連合講演会で一部発表(昭52・3)

* 大阪電気通信大学 寝屋川市初町 18-8

** 電子技術総合研究所大阪支所 尼崎市若王寺 16

* Faculty of Engineering, Osaka Electro-Communication University, Neyagawa

** Osaka Branch, Electrotechnical Laboratory, Amagasaki

(Received July 9, 1979)

(Revised December 22, 1979)

るための重み係数の補間に簡略化することによって、未知の応答曲線を推定するのである。

つぎに、提案した解析法を放射線の応答スペクトルの解析に適用する。放射線スペクトル測定における重要な問題の一つは、検出器・波高分析器系により観測されたスペクトルから、入射した放射線の真のスペクトルを推定することである^{5),6)}。このためのスペクトル推定法として、単色（単一エネルギー）の放射線による標準の応答スペクトルのライブラリーを用いる方式が広く採用されている^{7),8)}。これまでライブラリースペクトルの作成には、理論計算による方法⁹⁾や、単色 γ 線の実測応答スペクトルを経験的に定めた関数形でモデル化する方法¹⁰⁾が用いられてきた。当然標準のスペクトルは、現実の計測系の諸条件をすべて包含する点で、実測に基づいた形で得られることが望ましい。しかし後者の作成法では、それが応答曲線群の表面的な形状に着目した解析に基づくため、計算過程の複雑さや解の安定性の点で困難を伴い、関数に適合することは常に仮定できない。ここでは前述の曲線解析法をライブラリースペクトルの作成に応用する。

2. 解析の原理

2.1 応答行列の特異値分解

ある対象物理量 E をパラメータとする応答曲線が、 $E = E_i (E_i < E_{i+1}, i = 1, 2, \dots, m)$ において観測されたと仮定する (Fig. 1 参照)。各応答曲線を曲線の定義されている範囲内の n 個の座標点でサンプルし、その離散的表現を n 次元縦ベクトル $r_i (i = 1, 2, \dots, m)$ で示す。またこれらをまとめて行列表示するために、 $n \times m$ 応答行列 R を

$$R \triangleq [r_1, r_2, \dots, r_m] \quad (1)$$

で定義する。

さて、もし行列 R のランクを k とするならば、 R は k 個のランク 1 の行列の和として表現できる。この

Fig. 1 Example of response curves

とき、以下の形で行列を分解することを特異値分解という³⁾。

$$R = \mu_1 \eta_1 \xi_1^T + \mu_2 \eta_2 \xi_2^T + \dots + \mu_k \eta_k \xi_k^T \quad (2)$$

ただし、 T はベクトル（あるいは行列）の転置を表す。また、 n 次元ベクトル $\eta_i (i = 1, 2, \dots, k)$ は $n \times n$ 行列 RR^T の固有ベクトルであり、 m 次元ベクトル $\xi_i (i = 1, 2, \dots, k)$ は $m \times m$ 行列 $R^T R$ の固有ベクトルである。それぞれ長さ 1 に正規化されているものとする。対称行列 RR^T と $R^T R$ は k 個の正の同じ固有値をもち、 $\mu_i (i = 1, 2, \dots, k)$ はこれらの固有値の平方根に等しい。表記の都合上 $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_k$ の順序に並んでいるものとする。特に、 μ_i は特異値、 η_i と ξ_i はそれぞれ左と右特異ベクトルと呼ばれる。

ここで、観測データ曲線の数 m とサンプル点数 n の関係について述べる。複雑な応答曲線を忠実に離散的表現するには、サンプル点を十分細かく取る必要がある。すなわち点数 n はかなり大きいと予想される。他方、現実には実験系における種々の制約からデータ曲線数は過度に多く期待できない。したがって、一般性を失うことなく

$$m \leq n, k = m \quad (3)$$

と仮定する。もし、 $m > n$ の場合には、 $k = n$ と置き換えるのみで (2) 式はそのままの形で成立する。

2.2 成分パターンの抽出と近似表現

応答行列 R の分解を n 次元直交ベクトル $\eta_i (i = 1, 2, \dots, m)$ について整理すれば、個々の応答曲線 r_i はこれら m 個のベクトルの線形結合として表現できる。

$$r_i = c_{i1} \eta_1 + c_{i2} \eta_2 + \dots + c_{im} \eta_m \quad (4)$$

ここで係数は

$$c_{ij} = \mu_j \xi_{ij} (i, j = 1, 2, \dots, m) \quad (5)$$

である。ただし

$$\xi_j \triangleq [\xi_{1j}, \xi_{2j}, \dots, \xi_{mj}]^T \quad (6)$$

応答行列の分解から抽出された $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_m$ は単位エネルギーをもつ相関のない独立波形と考えることができる。これらは、いずれも応答曲線を表現するための基本の成分曲線を構成するものであり、基本成分パタ

Fig. 2 Curve expansion into basic-component patterns

ーンと呼ぶことにする. すなわち(4)式はつぎのように解釈できる. 与えられた m 個の応答曲線は同じ個数の独立した成分パターンをもち, 各曲線はそれらのパターンの線形結合として一意に展開でき, しかもその展開係数は応答行列に基づく固有値と固有ベクトルから決定できる (Fig. 2 参照).

さて, 曲線近似におけるこの展開法の大きな利点は, いくつかの互いに独立した成分パターンを用いて応答曲線を近似するとき, 近似誤差の2乗和を最小にする一つの解を与えることである. 実際, 最初から K 個の成分を用いた $\mathbf{r}_i$ の近似表現を

$$\mathbf{r}_{Ki} = c_{i1}\boldsymbol{\eta}_1 + c_{i2}\boldsymbol{\eta}_2 + \cdots + c_{iK}\boldsymbol{\eta}_K \quad (7)$$

とおけば, 誤差の2乗和は

$$J = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{Ki}\|^2 = \sum_{i=K+1}^m \mu_i^2 \quad (8)$$

となる. ただし, 記号 $\|\cdot\|$ は $\|\mathbf{x}\|^2 \triangleq \mathbf{x}^T \mathbf{x}$ と定義する. (8)式は, 特異値 μ_i の大きいほうから順に対応する基本成分パターンを採用することにより, 誤差の最小化ができることを示している. また, 採用した K 個の主成分の能率は相対的な評価数

$$P(K) = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{r}_{Ki}\|^2 / \sum_{i=1}^m \|\mathbf{r}_i\|^2 = \sum_{i=1}^K \mu_i^2 / \sum_{i=1}^m \mu_i^2 \quad (9)$$

で表わされる.

このように, 応答行列の特異値分解に基づく展開法の利用により, 小さな K の値でかなりよい近似表現が期待できる. データ圧縮に関しては, 観測された応答曲線のデータ数 nm が, 選択した主成分パターンに対して Kn および係数に対して Km となり, 合計 $K(n+m)$ に要約できたことになる.

2.3 未知応答曲線の推定

対象とした物理量 E の $E_1 \sim E_m$ の範囲において, 観測できなかった応答曲線を推定する問題は, 与えられた応答曲線の補間の問題となる. 選択した主成分パターンは, $E = E_1, E_2, \dots, E_m$ における観測曲線 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_m$ を最も精度よく近似表現しうるものであるから, 区間 $E_1 \leq E \leq E_m$ における未知応答曲線もまた同じ主成分パターンを用いて表現することができる. その推定値は連続パラメータ E の関数として

$$\hat{\mathbf{f}}(E) = \hat{c}_1(E)\boldsymbol{\eta}_1 + \hat{c}_2(E)\boldsymbol{\eta}_2 + \cdots + \hat{c}_K(E)\boldsymbol{\eta}_K, \quad E_1 \leq E \leq E_m \quad (10)$$

と書き表わせる. ここで, 係数 $\hat{c}_j(E) (j=1, 2, \dots, K)$ は, 補間点 E における各主成分に対する重み係数の推定値を示し, $E_1, E_2, \dots, E_m$ における観測曲線から得られた(5)式の係数 $c_{1j}, c_{2j}, \dots, c_{mj}$ を補間することにより決定される.

このように, n 次元ベクトルで記述された応答曲線の補間の問題は K 個の独立な重み係数の1次元補間に簡略化できることがわかった. さて, 求めた推定曲線の精度を定式化して考察することはできないが, 標準的に採用できる基準は主成分パターンの能率 $P(K)$ と重み係数のなめらかさを基本とする. すなわち, 主成分パターンのみを用いれば, 適当ななめらかな関数を重み係数に適合させて, 希望する補間点における重み係数を容易に決定でき, 未知曲線の信頼できる推定値を求めることができる.

ここで述べた補間法は, 曲線群の表面的な形状に着目した関数適合法とは対照的に, 曲線を主成分に分解し, 成分別に補間して能率を上げる方式である. このため, これを成分分解補間法と呼ぶことができよう.

3. 放射線応答スペクトルへの適用

応答スペクトルのライブラリーとしては, かなり数多くのエネルギーレベルにおける応答スペクトルが必要であるが, 任意のエネルギーをもった単色 γ 線源を得ることはできない. このため, つぎの方法が推奨される. まずできるだけ多くの単色 γ 線に対してスペクトル測定を行う. つぎに得られた応答スペクトル群を解析して, 希望するエネルギーにおける応答スペクトルを補間により推定し, ライブラリーを完成する.

解析の対象として, $3 \text{ in} \times 3 \text{ in NaI(Tl)}$ シンチレーション検出器と波高分析器を用いて Heath¹¹⁾ が得た単色 γ 線源の応答スペクトル群 (Fig. 3) を採用した. Fig. 3 の14種類の応答スペクトル曲線は, 波高分析器のチャンネル番号に対して, 線源からの放射光子

Fig. 3 Response spectra of a NaI detector to monoenergetic γ -ray sources (After Heath¹¹⁾)

Fig. 4 Superimposed spectral curves on the peak of spectrum ⑦

数と測定時間について基準化した計数値の分布を表わしている。表記の便宜上各応答スペクトルに、その入射 γ 線エネルギーの低いほうから順に ①($E_1=0.335$ (MeV))~⑭($E_{14}=1.78$ (MeV)) の番号を付けた。応答スペクトルのおもな特徴は右端の狭いピークとそれに続く左側の比較的平らな部分の二つからなり、物理的にはそれぞれ光電効果による応答領域およびコンプトン効果による応答領域と呼ばれる。ここでの目的は、光電効果によるピーク領域のみならず、コンプトン効果による領域も含めた応答スペクトル全体の姿を補間により推定することである。

3.1 スケール変換

Fig. 3 において各応答スペクトルはピーク位置が異なる互いにほぼ独立した波形とみなすことができる。これらを共通の成分パターンを用いて近似表現する場合、必要な成分の数が増えることは前章の原理から明らかである。ここではピーク位置のチャンネル番号と入射 γ 線エネルギーとが比例する計測系の性質を利用して、ピークを重ね合わせたスペクトル曲線群を作成し、この集合に対して解析を行った。Fig. 4 は、Fig. 3 の各原始スペクトルに対してチャンネルスケールを $E_i/E_7 (i=1, 2, \dots, 6, 8, \dots, 14)$ の倍率で拡大・縮小し、スペクトル⑦のピーク位置に他のピークが重なり合うように変換されたスペクトル曲線群を示す。この場合、観測できなかったエネルギー E の未知応答スペクトルの推定値は、変換した曲線群に基づいて補間した結果の曲線に対して倍率 E_7/E の逆スケール変換を行うだけで、容易に求めることができる。

3.2 主成分パターンの抽出と表現形式

まず Fig. 4 のスペクトル曲線 $r_1 \sim r_{14}$ を 10 チャンネルごとにサンプルして、 90×14 の応答行列を作成した。

Fig. 5 Principal-component patterns (All the library spectra of Fig. 4 are used)

つぎにその行列の特異値分解から、14 種類の基本成分パターン $\eta_1 \sim \eta_{14}$ を得た(付録参照)。このとき近似表現の能率は、第 1 成分のみを使用する場合 $P(1)=0.986$ 、第 1 と第 2 の 2 成分を用いる場合 $P(2)=0.999$ となり、これ以外の成分の寄与はきわめて小さいことがわかった。この結果より、主成分パターンは η_1 と η_2 であると決定した。これらの姿を Fig. 5 に示す。最も寄与の大きい η_1 は光電効果によるピーク領域を表現する成分であり、また η_2 はコンプトン効果による領域を表現するとともに、ピーク幅を調整する成分であることがはっきり認められる。さらに成分パターンに対する 2 種類の重み係数 $c_{i1}, c_{i2} (i=1, 2, \dots, 14)$ はエネルギー増大とともにそれぞれ単調に変化することが認められた。すなわち任意の応答スペクトルは、重み係数の推定値 $\hat{c}_1(E), \hat{c}_2(E)$ を用いて、 $f(E)=\hat{c}_1(E)\eta_1+\hat{c}_2(E)\eta_2$ の形で表現できる。

3.3 未知応答の推定精度

提案した方法の妥当性を調べるために、以下の手順で補間処理を実施した。まず、与えられた応答スペクトルのうちの一つが未知であると仮定して、これを観測ライブラリーから除去する。つぎに、残り 13 種類の応答スペクトルをもとにした補間により、その除去した応答曲線を再現する。そして、計算上無視した観測曲線と他の 13 種類の観測スペクトルからの推定曲線とを比較して、精度の検討を行う。スペクトル②、⑦、⑭に対するこれらの比較を Fig. 6 に示す。たとえば、スペクトル②の場合に対応する Fig. 6 の最初の結果は、Fig. 3 で②を除く 13 種類の曲線で上記の計算を行い②を補間して推定したものと、Fig. 3 の観測結果との比較を示す。ただし、 $\hat{c}_j(E) (j=1, 2)$ はつぎのようにして求めた。補間すべきエネルギーに近い観測点の重み係数に対して、入射 γ 線エネルギーを変数とする 2 次多項式を最小 2 乗法によってあてはめた。たとえば②の場合は、①、③、④の係数を多項式に適合し、 $E=0.393$ (MeV) における関数値 $\hat{c}_j(E)$ を得た。

Fig. 6 Interpolation results of spectra ②, ⑦, ⑬ based on 13 response spectra

Fig. 6 の 3 種類の結果から、推定精度は比較的 γ 線エネルギーの低いスペクトルのほうが良いことがわかる。また個々の応答領域を観察すれば、光電ピーク領域においてはいずれも推定曲線と観測曲線とのかなりの一致をみることができる。コンプトン領域においてはスペクトル⑬のエッジ部分の再現性が不十分といえる。

4. 検 討

γ 線スペクトルへの前章の適用結果は、計数値が大きく異なるスペクトル曲線群を対象とした場合、計数値の小さいスペクトル曲線の特にコンプトン領域の推定に若干の誤差が生じることを示した。精度を改善する簡単手段として、主成分パターンの個数を増やすことも考えられるけれども、雑音とみなされるような

Fig. 7 Improved interpolation result of spectrum ⑬

Fig. 8 Variations of weighting coefficients as a function of energy

成分を推定に使用することは、かえって誤差の増大をまねくことになる。成分分解補間法の前章の適用法はスペクトル曲線を絶対的な計数値で分解する方式である。この基本方式によるとコンプトン領域が狭くなる傾向にある。この領域を拡大する一つの改善策は、Fig. 4 においてスペクトル曲線群の平均値からの偏差曲線を解析することである。すなわち曲線群の平均値を $\bar{r}$ として、偏差曲線 $\Delta r_i \triangleq r_i - \bar{r}$ に関して成分分解補間法を適用し、推定値は $\hat{f}(E) = \Delta \hat{f}(E) + \bar{f}$ の形で得るのである。スペクトル②、⑦、⑬に対する補間を 3.3 節と同じ手順で行った。②と⑦についてはわずかに改善される程度であったが、⑬についてはかなり良好な結果を得た (Fig. 7 参照)。

なお、平均値に関する演算を追加した上述の改良方式において、偏差曲線の主成分パターンの姿とそれらの重み係数の変化の様子には、基本方式の場合と比べて、以下のような部分的な変更点が生じた。まず、主成分パターンの姿は Fig. 5 とほぼ同じであるが、コンプトン領域を表現する η_2 にエッジ部分を強調する成分が付加された。つぎに、2 種類の重み係数と γ 線エネルギーの関係を Fig. 8 に示す。各係数 c_{i1} , c_{i2} は観測点 i に関する平均が 0 となるように平行移動し

た形で求まっている。

このように、観測された14種類の応答スペクトルデータは、平均曲線と2種類の主成分パターンに対して270個および重み係数に対して28個の計298個の数値データに大幅に要約でき、しかもこれらのデータのみを使用してエネルギー区間 $E_1 \sim E_{14}$ の任意の応答スペクトルの良好な推定値を得ることができる。

5. お わ り に

本論文では、一般応答曲線の解析に対して特異値分解の適用を提案し、解析方法の原理を明らかにした。応答行列の特異値分解を使用した動機は、各応答曲線がいくつかの成分パターンの線形結合で表現できることであり、また多次元ベクトルで記述される曲線の複雑な補間がスカラーの重み係数の簡単な補間に簡略化できることであった。したがって本解析法は、データの大幅圧縮、解の安定性、処理の高速性等の利点をもつ。

つぎに、この方法を γ 線応答スペクトルの実測された曲線の解析に応用した。応答スペクトル曲線はわずか二つの主成分パターンを用いて表現でき、未知応答スペクトルの推定も容易であることがわかった。またいくつかの補間結果を例示し、推定精度を調べた。さらに改善策について検討を行い、 γ 線応答スペクトルのライブラリーを作成する手段を与えた。

参 考 文 献

- 1) J. T. Tou and R. C. Gonzalez: Pattern Recognition Principle, Addison, p. 269, Wesley Publishing Co. (1974)
- 2) J. G. Hayes, ed.: Numerical Approximation to Function and Data, p. 84, The Athlone Press (1970)
- 3) I. J. Good: Some Applications of the Singular Decomposition of a Matrix, Technometrics, **11**-4, 823/831 (1969)
- 4) C. R. Rao and S. K. Mitra: Generalized Inverse of Matrices and its Applications (邦訳—一般化逆行列とその応用), p. 6, 東京図書 (1973)
- 5) 井上: 放射線測定における Computer の役割, 応用物理, **37**-8, 760/761 (1968)
- 6) 富永 洋: ガンマ線スペクトルの電子計算機による解析, Radioisotopes, **20**-2, 45/53 (1971)
- 7) 富永昌治, 他: 高速フーリエ変換を用いた γ 線スペクトルの解析, Radioisotopes, **26**-12, 841/845 (1977)
- 8) F. Adams and R. Dams, eds.: Applied Gamma-Ray Spectrometry, p. 223, Pergamon Press (1975)
- 9) C. D. Zerby and H. S. Moran: Calculation of the Pulse-Height Response of NaI (TI) Scintillation Counters, USAEC Report ORNL-3169 (1961)
- 10) R. L. Heath, et al.: A Method for Generating Single Gamma-Ray Shapes for the Analysis of Spectra, Nucl. Instr. and Meth., **47**, 281/304 (1967)
- 11) R. L. Heath: Computer Techniques for the Analysis of Gamma-Ray Spectra Obtained with NaI and Lithium-Ion Drifted Germanium Detectors, Nucl. Instr. and Meth., **43**, 209/229 (1966)

《付 録》

(特異値分解の計算)

行列の特異値分解を実行するプログラムはいくつか発表されている。しかし応答曲線解析では、(3)式の制約が既知であること、また曲線近似には主成分だけ抽出できればよいことから、計算労力を軽減する分解法として、つぎの二つが实际的である。

(1) $m \times m$ 行列 $R^T R$ の固有値計算から $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_m$ と $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m$ を求め、(2)式から導かれる関係式 $\eta_i = (1/\mu_i) R^T \xi_i$ を用いて $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_m$ を得る。

(2) 最大固有値・固有ベクトルを反復計算によって求める Good³⁾の方法を使用する。まず μ_1, ξ_1, η_1 を同時に求め、元の応答行列からこの第1成分を取り除いた行列 $R - \mu_1 \eta_1 \xi_1^T$ を作成する。同様にして μ_2, ξ_2, η_2 を求め、この過程を μ_K, ξ_K, η_K まで繰り返す。ただし、 $P(K)$ の算出には $\sum_{i=1}^m \mu_i^2 = \text{tr}[R^T R]$ (tr は行列のトレース) を利用する。

計算速度は行列の大きさと性質に大きく依存するが、3章の応答行列については(1)の方法と $K=3$ とした(2)の方法とがほぼ同程度の計算時間であった。本論文の計算結果はすべて(1)による。