ZRÍNYI MIKLÓS NEMZETVÉDELMI EGYETEM
BOLYAI JÁNOS KATONAI MŰSZAKI KAR
KATONAI MŰSZAKI DOKTORI ISKOLA

Hanka László

Szcintillációs gamma spektrumok gyors és hatékony kiértékelésére alkalmazható numerikus módszerek továbbfejlesztése

Doktori (PhD) Értekezés

TÉZISFÜZET

Témavezető: Dr. Vincze Árpád PhD.

2010. BUDAPEST

A tudományos probléma megfogalmazása

Napjainkban a terepi körülményeknek leginkább megfelelő, egyszerűen kezelhető, robosztus szerkezetű, hordozható szcintillációs detektorrendszerek alkalmazása és fejlesztése ismét előtérbe került. A kiváló hatásfok mellett a rosszabb felbontás miatt az így felvett gamma spektrumok kiértékelése azonban – különösen összetett sugárforrás esetében – nem egyszerű feladat, mert a szcintillációs műszerek, felépítésük folytán, bonyolult szerkezetű spektrumot szolgáltatnak. Ezek a spektrumok ránézésre nem értékelhetők ki, különösen több izotóp együttes jelenléte esetén, mert egyrészt – a félvezető detektorokéhoz képest rosszabb energiafelbontás miatt – a közeli energiáknál fellépő csúcsokat egybemoshatják, másrészt a nagyobb aktivitású izotóp teljes-energia csúcsa egyszerűen láthatatlanná teheti, eltakarhatja a kisebb aktivitású izotóphoz tartozó fotocsúcsot, ilyen módon lehetetlenné téve egyes izotópok jelenlétének kimutatását. A γ-spektrum felvétele egy csatornás vagy sokcsatornás amplitúdó analizátorral történhet. Az egy csatornás analizátorban a detektorból jövő elektromos jelek nagyság szerinti szétválogatását a differenciál diszkriminátor végzi. A spektrumok felvételéhez általam alkalmazott detektorok n = 256, 512 és 1024 csatornás analizátorral vannak felszerelve. Ez az adat számítástechnikailag azért fontos, mert a válasz mátrix egy $n \times n$ méretű mátrix.

A tényleges és a méréssel kapott gamma-spektrum kapcsolatát egy lineáris egyenletrendszerrel írhatjuk le. Ennek az egyenletrendszernek a megoldása – amelyet dekonvolúciónak nevezünk –, egy összetett probléma, ugyanis a megoldás a mérési hibák következtében instabilis. Ennek az az oka, hogy az egyenletrendszer mátrixa szinguláris, ezért a megoldás nagyon érzékeny a hibákra. A mérési hibák létezése és a rendszer együtthatómátrixának szingularitása jelentős mértékben befolyásolja az alkalmazható dekonvolúciós módszerek hatékonyságát. Matematikai szempontból a problémát a mátrix szingularitása, az együtthatómátrix kicsi sajátértékei jelentik. A klasszikus egyenletrendszer megoldási módszerek nem eléggé hatékonyak, stabilis, a hibákra kevésbé érzékeny megoldás előállításához regularizációs módszereket kell alkalmazni. Ez azt jelenti, hogy az eredeti problémát illetve annak megoldását egy olyan problémával illetve annak megoldásával közelítjük, amely számottevően kevésbé érzékeny a hibákra.

Rátérve a probléma matematikai szempontból történő bemutatására, dekonvolúciós eljárásoknak nevezzük azokat a módszereket, amelyek segítségével a méréssel kapott spektrumból visszakövetkeztetve meghatározzuk a γ-sugárzás intenzitás eloszlását a frekvencia ill. hullámhossz függvényében. Ehhez azt kell meggondolnunk, hogy a detektorban megjelenő kimenő jel lényegében a detektorra érkező bemenő jeleknek és a detektorra jellemző, az abban lezajló folyamatokat leíró $\mathbf{r} \in \Re^m$ vektornak a konvolúciója, ahol „m" a detektor csatornáinak a száma. Minden egyes energia intervallumhoz tartozik egy **r** vektor, ezekből képezve egy m×n méretű **R** mátrixot a detektor válasz mátrixát kapjuk, melynek R_{ij} eleme annak valószínűsége, hogy a j-edik energiasávba tartozó foton az i-edik energia intervallumban lesz detektálva. Ez más szavakkal azt is jelenti, hogy a válasz mátrix minden egyes oszlopa egy diszkrét valószínűség eloszlás. Mivel a detektorhoz csatlakozó analizátor véges sok csatornában dolgozza fel a jeleket, a kimenő jelsorozatot egy diszkrét $\mathbf{y} \in \Re^m$ vektornak tekinthetjük. A számítandó impulzusokat pedig jelölje az $\mathbf{x} \in \Re^n$ vektor. A két vektor komponenseinek kapcsolatát az $\mathbf{y} = \mathbf{Rx}$ összefüggés írja le. Ebből az egyenletből az $\mathbf{x} \in \Re^n$ valós spektrum meghatározását nevezzük dekonvolúvciós eljárásnak. A dekonvolúció akkor oldható meg eredményesen, ha magát az $\mathbf{R} \in \Re^{m\times n}$ válasz mátrixot ismerjük. Ennek a kérdéskörnek a részletes vizsgálata is megtalálható az értekezésben. Azonban pusztán az **R** mátrix ismerete messze nem elégséges az eredményes megoldáshoz.

A módszerek azonban mind azt célozzák, hogy a **y** = **Rx** lineáris egyenletrendszert megoldják az **x** vektorra vonatkozólag az **y** és **R** ismeretében, ezt az eljárást nevezzük dekonvolúciónak. Alapvetően tehát egy lineáris algebrai inverz problémával állunk szemben. Az **Rx** = **y** inverz feladat általában nagyon érzékeny a mérési hibára. Az ilyen típusú inverz problémák megoldásával kapcsolatosan három lényeges kérdés illetve probléma merül fel:

1. **Egzisztencia**. Azaz a megoldás létezése. A probléma természetétől függően, tetszőleges értékek esetén létezik-e a kívánalmaknak megfelelő megoldás?

2. **Egyértelműség**. Minden adatsor esetén egyértelmű-e a megoldás abban az értelemben, ahogy a probléma megkívánja?

3. **Stabilitás**. A megoldás folytonosan függ-e az adatoktól?

Mint az értekezésből kiderül, a spektrumok esetében felmerülő inverz probléma teljesíti az 1. és 2. kitételt, de nem teljesül a 3. kívánalom, ez pontosan azt jelenti, hogy ennek az inverz problémának a megoldása nagymértékben érzékeny a hibákra. Ennek az értekezésnek éppen az a célja, hogy olyan numerikus algoritmusokat mutasson be, amelyek jelentős mértékben érzéketlenek a zajra.

Kutatási módszerek

A kutatómunkámnak alapvetően fontos része volt a témakörrel foglalkozó szakirodalom tanulmányozása, mert az adott matematikai problémakör említett irányú alkalmazása meglehetősen „friss", a kutatómunkát így elsősorban szakfolyóiratok cikkeinek tanulmányozása jelenti. Ezek eredményeire támaszkodva, ezek módosításával, továbbfejlesztésével illetve a matematika, adott problémakörre eddig nem alkalmazott fejezeteinek felhasználásával sikerült olyan algoritmusokat kidolgoznom, amely az adott alkalmazások szempontjából megfelelő. A matematikai sokrétűségnek az az oka, hogy az értekezésben vizsgált algoritmusokat nem kizárólag szcintillációs gamma-spektrumok kiértékelésére lehet alkalmazni, hanem számos olyan probléma megoldására is, amely – elvonatkoztatva a konkrétumoktól – ugyanolyan természetű matematikai problémára vezet. Az „Ajánlások” című pontban részletesebben utalok az alkalmazási lehetőségekre, egymástól „idegen” tudományterülteken.

Munkamódszeremhez hozzátartozik, hogy először mindig ideális esetekre, ideális Gauss spektrumokra és ideális detektorokra alkalmaztam az eljárásokat. Ezután az idealizáción lazítottam, zajjal terhelt spektrumot és válasz mátrixot alkalmaztam. Ennek érdekében szerkesztettem egy egyszerű Monte-Carlo algoritmust, amellyel szimulálni lehet a valós spektrumokban tapasztalható fluktuációkat. Alkalmam volt méréseket végezni három különböző szcintillációs detektorral, rendelkezésre állt kilenc radioaktív izotóp, összességében felvettem kísérleti úton csaknem 50 spektrumot. Ezeket a spektrumokat használtam fel a dekonvolúciós algoritmusok hatékonyságának végső tesztelésére és a generált válasz mátrix validálására.

A válasz mátrix előállítására egy Monte Carlo algoritmust szerkesztettem, amely a teljes energia csúcsok és a Compton-tartomány javított, analitikusan könnyen kezelhető függvényekkel történő leírásán alapul. A válasz mátrix validálását úgy végeztem el, hogy összevettetem a Monte Carlo kóddal generált spektrumokat a kísérletileg kapott spektrumokkal és az egyezés kiválónak mutatkozott.

Az értekezés rövid tartalma fejezetenként

Az **első fejezet**ben bemutattam a gamma spektrumok kiértékelésével kapcsolatos problémákat. Részleteztem a szakirodalomban alkalmazott klasszikus módszereket és ezek elégtelenségét. Vázoltam a kutatási módszereket és a célkitűzéseket.

A **második fejezet** az értekezés legfőbb és legterjedelmesebb fejezete. Ebben tanulmányoztam a szakirodalomban fellelhető dekonvolúciós módszereket, megvizsgáltam a hatékonyságukat és azt a kérdést, hogy hogyan lehet javítani ezeken a módszereken. Megmutattam, hogy klasszikus iterációs módszerek is eredménnyel alkalmazhatók, és kifejlesztettem több új algoritmust.

A klasszikus egyenletrendszer megoldási módszerek nem eléggé hatékonyak, stabilis, a hibákra kevésbé érzékeny megoldás előállításához regularizációs módszereket kell alkalmazni. Ez azt jelenti, hogy az eredeti problémát illetve annak megoldását egy olyan problémával illetve annak megoldásával közelítjük, amely számottevően kevésbé érzékeny a hibákra. Ebben a dolgozatban néhány hatékony regularizációs módszert mutatunk be. De bemutatom azt is, hogy a hagyományos regularizációs technikák nem alkalmasak a feladat megoldására.

A maximum entrópia módszer egy olyan valószínűségelméleti eljárás, amely eredményesen alkalmazható gamma-spektrumok dekonvolúciójára. A maximum entrópia elvnek számos előnye van a hagyományos dekonvolúciós módszerekhez képest. A módszer alkalmazásával nagyobb felbontású spektrumot kapunk, mint a lineáris regularizációs technikákkal, a megoldásként kapott spektrum szükségképpen nem negatív és a módszer lehetőséget ad arra is, hogy egyszerűen figyelembe vegyük a χ^2 statisztikát, amellyel kompenzálni lehet a fluktuációk hatását. Az értekezésemben sikerült javítani a módszer tulajdonságain ritkamátrixok alkalmazásával.

A maximum likelihood becslés egy nagyon hatékony statisztikai módszer, amelyet akkor alkalmazunk, ha a rendelkezésre álló adatokhoz legjobban illeszkedő matematikai modellt szeretnénk meghatározni. A módszer lehetőséget ad arra, hogy a matematikai modell szabad paramétereit úgy hangoljuk, hogy az illeszkedés optimális legyen. A várható érték maximalizálásának elve olyan valószínűségi modellek paramétereinek maximum likelihood becslésére ad lehetőséget, amelyek olyan „rejtett” változóktól illetve paraméterektől függenek, amelyeket nem lehet közvetlenül megfigyelni. Ez az elmélet azonban akkor is nagyon hatékonyan alkalmazható, ha aktivitás meghatározást szeretnénk elvégezni, ezzel a kérdéssel a 3. fejezetben foglalkozom.

Kifejlesztettem néhány új, nagyon hatékony numerikus algoritmust, amelyek bizonyítottan gyorsabbak és nagyobb felbontásúak mint a hagyományos módszerek. Módosítottam a hagyományos regularizációs technikán is, bevezettem a „súlyozott regularizáció” fogalmát és bizonyítottam, hogy ez a módszer sokkal kevésbé érzékeny a regularizációs paraméter értékére mint a többi eljárás. Ez egy nagyon hatékony módszernek bizonyult, amely rendelkezik a következő két tulajdonsággal. Az algoritmus szolgáltatja a rejtett gamma vonalakat egy Dirac-delta függvény formájában és szétválasztja az átfedő foto-csúcsokat.

A vázolt inverz lineáris algebrai problémát a továbbiakban kvadratikus programozási feladatként kezeltem. Ennek megoldására két nagyon hatékony matematikai eljárást alkalmaztam. Elsőként a konjugált gradiens módszert majd az aktív halmazok módszerét. A **konjugált gradiens módszer** egy nagyon hatékony eljárás egy szimmetrikus és pozitív definit mátrixszal adott lineáris rendszer megoldására. Ez az iteratív módszer ugyancsak eredményesen alkalmazható olyan optimalizálási problémák numerikus megoldására, mint például egy kvadratikus programozási feladat. Az **aktív halmazok módszere** mint egy külső, vezérlő algoritmus működik. Ennek alkalmazása biztosítja azt, hogy a megoldás pozitív szemidefinit.

Alapvető kérdés minden algoritmussal kapcsolatban a válasz mátrix invertálásának problémája. A hagyományos inverz alkalmazása erre a feladatra teljességgel alkalmatlan. Sokkal hatékonyabb eszköz az általánosított inverz fogalma, de ennek kiszámítása nagyon sok műveletet igényel. Ezért vizsgáltam annak lehetőségét hogy az inverz mátrixot más eljárással állítsam elő. Bizonyítottam, hogy a Cholesky-felbontás és a QR-felbontás szintén eredményesen alkalmazható ebben a problémakörben. Leírtam két független algoritmust amelyekben ezt a két módszert alkalmaztam az invertálásra, és igazoltam, hogy a ezek az eljárások sokkal gyorsabbak, mint a szinguláris felbontáson alapuló eljárások.

A **harmadik fejezet**ben azt vizsgáltam, hogyan lehet meghatározni a sugárzó izotópok aktivitását abban az esetben amikor a spektrumban átfedő foto-csúcsok vannak, illetve amikor egyszerre több izotóp sugároz egyszerre. Megadtam két független módszert amelyek eredményesen alkalmazhatók az említett esetekre. Az első esetben a Gauss-féle normál egyenletekre alapoztam az iterációt. Ez a módszer szeparálja az átfedő Gauss-függvényeket. A második algoritmus, amely a legáltalánosabb esetben is alkalmazható, a maximum likelihood elven alapszik. Ennek alkalmazása feltételezi a válasz mátrix ismeretét. Ennek előállításával az 5. fejezetben foglalkoztam.

A **negyedik fejezet**ben a dekonvolúciós módszerek zajra vonatkozó érzékenységét vizsgáltam. A diszkrét Fourier-transzformáció alkalmazásával igazoltam, hogy a simító konvolúciós eljárás határozottan ront a dekonvolúcióval kapott megoldások tulajdonságain. A felbontás rosszabb és megjelennek a megoldásban hamis csúcsok. Azonban az is kiderült, hogy ha a spektrum extrém nagy zajjal terhelt, a dekonvolúciós technikák akkor is pontos megoldást szolgáltatnak. Mellékesen leírtam, hogyan lehet előállítani a spektrum második deriváltját, és vizsgáltam ezen klasszikus módszer tulajdonságait.

Az **ötödik fejezet**ben azt vizsgáltam, hogyan lehet előállítani egy detektor válasz mátrixát. Leírtam az eljárást, hogy milyen módon lehet egy detektort kalibrálni, megadtam a szükséges algoritmusokat. Részletesen vizsgáltam a foto-csúcs és a Compton-tartomány előállításának kérdését. Javítottam ezen tartományok analitikus leírásán. Kidolgoztam egy Monte Carlo algoritmust, amellyel egy válasz mátrixot generálni lehet. A válasz mátrixot validáltam elméleti és méréssel kapott spektrumok felhasználásával. Végezetül igazoltam, hogy a dekonvolúciós módszerek és a generált válasz mátrix együttesen egy gyors és hatékony eszköz ismeretlen izotópok azonosítására.

TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK

I. A lineáris algebra és a matematikai programozás apparátusát felhasználva kidolgoztam olyan regularizációs technikákon alapuló iterációs algoritmusokat, amelyek eredményesen alkalmazhatók **szcintillációs gamma-spektrumok gyors és hatékony dekonvolúciójára**.

1. Sikeresen alkalmaztam dekonvolúcióra a Konjugált Gradiens módszert és az Aktív Halmazok módszerét.
2. Kidolgoztam egy olyan algoritmust, amely mátrixok szinguláris felbontásának előállításával alkalmazható dekonvolúcióra.
3. A „súlyozott regularizáció" módszerének bevezetésével és mátrixok Cholesky-felbontásának illetve QR-felbontásának alkalmazásával jelentősen megjavítottam a regularizációs technikák hatékonyságát.

Bebizonyítottam, hogy ezek az eljárások gyorsabban konvergálnak és nagyobb felbontású megoldást szolgáltatnak, mint a szakirodalomban alkalmazott módszerek.

Sikeresen javítottam a hagyományos dekonvolúciós módszerek hatékonyságán:

1. Igazoltam, hogy a Gauss-Seidel iteráció regularizált, relaxált változata is alkalmas dekonvolúcióra.
2. Numerikus technikák alkalmazásával javítottam klasszikus módszerek (MEM, ML) hatékonyságán.

II. A dekonvolúciós módszerek eredményeit felhasználva leírtam olyan iterációs algoritmusokat amelyek alkalmasak **aktivitás-meghatározásra.**

1. Kidolgoztam egy **iterációs algoritmust, amely alkalmas multiplett foto-csúcsok**at tartalmazó spektrumok esetében aktivitás számításra.
2. A **maximum-likelihood becslés** alkalmazásával levezettem egy nemlineáris iterációs formulát arra az estre, amikor a **detektor egyszerre több izotóp spektrumát rögzíti**.

III. Kidolgoztam az eljárást amelynek segítségével egy **szcintillációs gamma-detektor kalibrálható**, elvégeztem kalibrációt mindhárom detektorra vonatkozólag amelyekkel a méréseimet végeztem.

IV. Leírtam egy **Monte Carlo algoritmust**, amelynek segítségével egy szcintillációs detektor **válasz mátrixa generálható**.

1. Javítottam a foto-csúcsok Gauss görbéinek analitikus leírásán és megadtam a foto-csúcsok generálására vonatkozó Monte Carlo algoritmust.
2. Megjavítottam a Compton-tartomány analitikus leírását, és kidolgoztam a Compton-kontinuum előállításának módszereit E < 1 MeV és E > 1 MeV energiatartományban.

Validáltam a leírt algoritmusokat és előállítottam a válasz mátrixot mindhárom detektorra vonatkozólag amelyekkel a méréseimet végeztem.

V. Összeállítottam egy **MATLAB-ban implementált szoftverrendszert**, amelynek segítségével egy tetszőleges szcintillációs detektor esetében elvégezhető a következő:

1. A kalibrációs eljárás;
2. Generálható a detektor válaszfüggvénye;
3. Dekonvolúciós algoritmussal elvégezhető az izotópazonosítás;
4. Számítható az aktivitás.

AJÁNLÁSOK

Az értekezés legfontosabb részét képezik a dekonvolúciós algoritmusok, hiszen ezek a módszerek hiányoznak leginkább az adott témával foglalkozó szakirodalomból. A gamma-spektroszkópiában dekonvolúciónak nevezett eljárás matematika szempontból pedig nem más, mint egy rosszul kondicionált, „ill-posed” lineáris egyenletrendszernek a megoldása, amely jelentős mértékben érzéketlen a mérési eredményeket, tehát a rendszer „jobboldalát” terhelő zajra, de tekinthetjük a feladatot optimalizálási problémaként is. Ilyen feladatok más tudományterületeken is előkerülnek, reményeim szerint a kidolgozott módszerek ezen területek vizsgálatában is hatékonyan alkalmazhatók.

Ilyenek a következők:

1. **Katonai** alkalmazás: Szcintillációs gamma-spektrumok vizsgálata terepi illetve laboratóriumi körülmények között.
2. Polgári- illetve **katasztrófavédelmi** alkalmazás: Itt utalunk a terrorfenyegetettség kérdésére, a piszkos bomba bevetésének lehetőségére, esetleg nukleáris balesetek lehetőségére.
3. A **gamma csillagászatban** a gamma kitörések spektrumának vizsgálatában.
4. A **méréstechnikában** tisztán matematikai feladatként tekintve, egyes paraméterillesztési problémák rosszul kondicionált feladatra vezetnek.
5. **Közgazdaságtanban** bizonyos portfolió elemzési problémák is ilyen matematikai feladatra vezetnek.
6. A **műszaki gyakorlatban** számos gépészmérnöki, építészmérnöki probléma van amely rosszul kondicionált optimalizálási feladatra vezet: például több változótól, mint terheléstől függő optimális méretezés feladata.
7. A **logisztikában** több telephelyet érintő optimális szállítás problémája.