

**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

**Témavezető: Dr. Vincze Árpád PhD.**

**2010. BUDAPEST**

# TARTALOMJEGYZÉK

<b>AZ ÉRTEKEZÉSBEN HASZNÁLT JELÖLÉSEK, RÖVIDÍTÉSEK, SZIMBÓLUMOK JEGYZÉKE .....</b>	<b>1</b>
<b>BEVEZETÉS.....</b>	<b>2</b>
A TUDOMÁNYOS PROBLÉMA MEGFOGALMAZÁSA.....	2
KUTATÁSI CÉLKITŰZÉSEK.....	3
KUTATÁSI MÓDSZEREK.....	3
<b>I. FEJEZET: SZCINTILLÁCIÓS GAMMA-SPEKTRUMOK KIÉRTÉKELÉSÉVEL KAPCSOLATOS KÉRDÉSEK ÉS PROBLÉMÁK ÁTTEKINTÉSE .....</b>	<b>6</b>
I.1. A SPEKTRUMKIÉRTÉKELÉS MINT MATEMATIKAI PROBLÉMA.....	6
I.2. HAGYOMÁNYOS SPEKTRUM KIÉRTÉKELÉSI MÓDSZEREK .....	15
I.3. AZ ALKALMAZOTT SZOFTVER, A „MATLAB”, ÉS AZ INFORMATIKAI KÖRNYEZET VÁZLATOS BEMUTATÁSA .....	20
ÖSSZEGZÉS.....	22
<b>II. FEJEZET: DEKONVOLÚCIÓS MÓDSZEREK.....</b>	<b>24</b>
II.1. KLASSZIKUS LINEÁRIS ALGEBRAI ITERÁCIÓS ALGORITMUSOK ÉS EZEK JAVÍTOTT VÁLTOZATAI .....	24
II.1.1. GAUSS-SEIDEL ITERÁCIÓ.....	25
II.1.2. A GAUSS-SEIDEL ITERÁCIÓ REGULARIZÁCIÓJA .....	27
II.1.3. A GAUSS-SEIDEL ITERÁCIÓ GYORSÍTÁSA RELAXÁCIÓVAL.....	32
II.1.4. A VAN-CITTERT ITERÁCIÓ ÉS MÓDOSÍTOTT VÁLTOZATA .....	34
II.1.5. A GOLD-FÉLE ITERÁCIÓ ÉS JAVÍTOTT VÁLTOZATA.....	37
II.2. DEKONVOLÚCIÓ MINT OPTIMALIZÁLÁSI PROBLÉMA, MEGOLDÁS KVADRATIKUS PROGRAMOZÁSI FELADATKÉNT .....	40
II.2.1. A KONJUGÁLT GRADIENS MÓDSZER.....	42
II.2.2. A KONJUGÁLT GRADIENS MÓDSZER JAVÍTÁSA PREKONDÍCIONÁLÁSSAL .....	46
II.3. AZ AKTÍV HALMAZOK MÓDSZERE .....	48
II.3.1. AZ AKTÍV HALMAZ MÓDSZER ÉS A KONJUGÁLT GRADIENS MÓDSZER EGYÜTTES ALKALMAZÁSA.....	49
II.3.2. AZ AKTÍV HALMAZOK MÓDSZERÉNEK EGY PONTOSABB VÁLTOZATA, MÁTRIXOK SZINGULÁRIS FELBONTÁSÁNAK ALKALMAZÁSA .....	53
II.4. DEKONVOLÚCIÓ „SÚLYOZOTT REGULARIZÁCIÓVAL” .....	56
II.4.1. SÚLYOZOTT REGULARIZÁCIÓ CHOLESKY-FELBONTÁSSAL.....	58
II.4.2. KONDÍCIÓSZÁM CSÖKKENTÉS GRAM-SCHMIDT ORTOGONALIZÁCIÓVAL .....	60
II.5. DEKONVOLÚCIÓ A MAXIMUM-LIKELIHOOD ELV ALKALMAZÁSÁVAL .....	64
II.5.1. DEKONVOLÚCIÓ A MAXIMUM LIKELIHOOD BECSLÉS ÉS A VÁRHATÓ ÉRTÉK MAXIMALIZÁLÁSÁNAK ELVE ALAPJÁN .....	65
II.5.2. A MAXIMUM-LIKELIHOOD ALGORITMUS FELBONTÁSÁNAK JAVÍTÁSA AZ AKTÍV HALMAZOK MÓDSZERÉNEK ALKALMAZÁSÁVAL .....	68
II.6. A MAXIMUM-ENTRÓPIA MÓDSZER .....	71
II.6.1. DEKONVOLÚCIÓ MAXIMUM ENTRÓPIA MÓDSZERREL.....	72
II.6.2. A „MEM” KONVERGENCIÁJÁNAK GYORSÍTÁSA RITKAMÁTRIXOKKAL .....	76
II.7. ÖSSZEGZETT KÖVETKEZTETÉSEK .....	77
<b>III.FEJEZET: AKTIVITÁS MEGHATÁROZÁSA MULTIPLITT FOTOCÚCSOK ESETÉN, A DEKONVOLÚCIÓ MÓDSZEREINEK ALKALMAZÁSA.....</b>	<b>78</b>
III.1. CSÚCSTERÜLETEK MEGHATÁROZÁSA MULTIPLITT FOTOCÚCSOK ESETÉN.....	78
III.2. A MAXIMUM-LIKELIHOOD BECSLÉS ALKALMAZÁSA AKTIVITÁS-BECSLÉSRE ÖSSZETETT SPEKTRUMOK ESETÉN .....	84
III.3. ÖSSZEGZETT KÖVETKEZTETÉSEK .....	87
<b>IV.FEJEZET: A ZAJSZŰRÉS LEHETŐSÉGÉNEK VIZSGÁLATA, A DISZKRÉT FOURIER-TRANSZFORMÁCIÓ ALKALMAZÁSA .....</b>	<b>89</b>
IV.1. ZAJSZŰRÉS KONVOLÚCIÓVAL.....	89
IV.2. ZAJSZŰRÉS DISZKRÉT FOURIER-TRANSZFORMÁCIÓVAL .....	91
IV.3. CSÚCSKERESÉS MÁSODIK DERIVÁLTAKKAL .....	93
IV.4. A DEKONVOLÚCIÓS ALGORITMUSOK ZAJRA VONATKOZÓ ÉRZÉKENYSÉGE, A ZAJSZŰRÉS LEHETŐSÉGÉNEK VIZSGÁLATA .....	96
IV.5. ÖSSZEGZETT KÖVETKEZTETÉSEK.....	100

<b>V. FEJEZET: SZCINTILLÁCIÓS DETEKTOROK VÁLASZ MÁTRIXÁNAK ELŐÁLLÍTÁSA GENERÁLT ÉS MÉRÉSEL KAPOTT SPEKTRUMOK FELHASZNÁLÁSÁVAL .....</b>	<b>102</b>
V.1. A KALIBRÁCIÓS FÜGGVÉNYEK PARAMÉTEREINEK ILLESZTÉSE .....	103
V.1.1. GAUSS-GÖRBE ILLESZTÉSE A FOTOCÚCSOKRA.....	105
V.1.2. ENERGIAKALIBRÁCIÓ .....	106
V.1.3. SZÓRÁS KALIBRÁCIÓ .....	107
V.1.4. A „CSÚCS PER ÖSSZES” FÜGGVÉNY KALIBRÁCIÓJA.....	109
V.1.5. HIBASZÁMÍTÁS.....	113
V.2. A VÁLASZ MÁTRIX GENERÁLÁSA .....	115
V.2.1. A FOTOCÚCS GENERÁLÁSA MONTE-CARLO ALGORITMUSSAL .....	115
V.2.2. A COMPTON-CONTINUUM KÖZELÍTÉSE MONTE-CARLO ALGORITMUSSAL .....	118
V.2.2.1. A COMPTON-CONTINUUM KÖZELÍTÉSE AZ $E < 1$ MeV ENERGIATARTOMÁNYBAN .....	119
V.2.2.2. A COMPTON-CONTINUUM KÖZELÍTÉSE AZ $E > 1$ MeV ENERGIATARTOMÁNYBAN .....	126
V.2.2.3. A COMPTON-ÉL LEKEREKÍTÉSE.....	128
V.2.3. SZCINTILLÁCIÓS DETEKTOR VÁLASZ MÁTRIXÁNAK ELŐÁLLÍTÁSA .....	129
V.3. IZOTÓPAZONOSÍTÁS DEKONVOLÚCIÓVAL, A DEKONVOLÚCIÓS ALGORITMUSOK ÉS VÁLASZ MÁTRIXOK EGYÜTTES ALKALMAZÁSA.....	131
V.3.1. ELMÉLETILEG GENERÁLT SPEKTRUMOK DEKONVOLÚCIÓJA .....	132
V.3.2. AZ IH-111L DETEKTORRAL FELVETT SPEKTRUMOK DEKONVOLÚCIÓJA.....	136
V.4. ÖSSZEGZETT KÖVETKEZTETÉSEK .....	140
<b>TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK .....</b>	<b>142</b>
<b>AJÁNLÁSOK .....</b>	<b>143</b>
<b>SAJÁT PUBLIKÁCIÓK .....</b>	<b>144</b>
<b>FELHASZNÁLT IRODALOM .....</b>	<b>144</b>
<b>MELLÉKLET .....</b>	<b>148</b>

## AZ ÉRTEKEZÉSBEN HASZNÁLT JELÖLÉSEK, RÖVIDÍTÉSEK, SZIMBÓLUMOK JEGYZÉKE

1.  $\mathfrak{R}$ : A valós számok halmaza.
2.  $\mathbf{x}$ :  $n$ -komponensű valós oszlopvektor (vastagon szedett nyomtatott kis betű).  
Megállapodás szerint a „vektor” minden esetben „oszlopvektor”-t jelent!
3.  $x(i)$ : Az  $\mathbf{x}$  vektor  $i$ -edik koordinátája. Alternatív jelölés:  $x_i$ .
4.  $\mathfrak{R}^n$ : Az  $n$ -komponensű valós oszlopvektorok halmaza.
5.  $\mathbf{x}^*$ : Az  $n$  komponensű  $\mathbf{x}$  oszlopvektor transzponáltja:  $n$  komponensű sorvektor.
6.  $\mathbf{A}$ :  $n \times k$  méretű, azaz  $n$  sort és  $k$  oszlopot tartalmazó valós mátrix
7.  $A_{rp}$ : Az  $\mathbf{A}$  mátrix  $r$ -edik sorának  $p$ -edik komponense.
8.  $\mathfrak{R}^{n \times k}$ : Az  $n \times k$  méretű valós mátrixok halmaza.
9.  $\mathbf{A}^*$ : Az  $n \times k$  méretű  $\mathbf{A}$  mátrix transzponáltja;  $k \times n$  méretű mátrix.
10.  $\|\mathbf{A}\|$ : Az  $\mathbf{A}$  mátrix Euklideszi normája, tehát az az  $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$  mátrix maximális sajátértékének négyzetgyöke. Alternatív jelölés ugyanerre a fogalomra:  $\text{norm}(\mathbf{A})$ .
11.  $r(\mathbf{A})$ : Az  $\mathbf{A}$  mátrix rangja, azaz a lineárisan független oszlopvektorainak maximális száma.
12.  $\mathbf{E}$ : Az  $n \times n$  méretű identitásmátrix, az a mátrix, melynek főátlójában 1-esek vannak, a többi komponense zérus.
13.  $\mathbf{x}^{(k)}$ : Egy iterációs algoritmusban a keresett  $\mathbf{x}$  vektor közelítése a  $k$ -edik iterációs lépésben.
14.  $\mathbf{x}^{(0)}$ : Az iteráció kezdővektora.
15.  $\langle \mathbf{x}; \mathbf{y} \rangle$ : Az  $\mathfrak{R}^n$ -beli  $\mathbf{x}$  és  $\mathbf{y}$  vektorok skaláris (vagy „belső”) szorzata:  $x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n$ .  
Nem más, mint az  $\mathbf{x}^*$  sorvektor és az  $\mathbf{y}$  oszlopvektor „sor-oszlop” szorzata:  $\mathbf{x}^* \mathbf{y}$ .
16.  $\|\mathbf{x}\|$ : Az  $\mathbf{x}$  vektor Euklideszi normája:  $\|\mathbf{x}\|^2 = \langle \mathbf{x}; \mathbf{x} \rangle = \mathbf{x}^* \mathbf{x}$ .
17.  $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ : A jelölés azt jelenti, hogy az  $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$  vektor minden komponense nem negatív.
18.  $\mathbf{AB}$ : Az  $\mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{n \times k}$  és a  $\mathbf{B} \in \mathfrak{R}^{k \times p}$  mátrixok „sor-oszlop” szorzata. Ha  $\mathbf{C} = \mathbf{AB}$ , akkor  $\mathbf{C} \in \mathfrak{R}^{n \times p}$ , és  $C_{ij} = A_{i1} B_{1j} + \dots + A_{ik} B_{kj}$ .
19.  $\frac{\partial \Phi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$ : Az  $n$  komponensű  $\mathbf{x}$  vektortól függő, tehát  $n$ -változós valós értékű  $\Phi(\mathbf{x})$  függvény gradiense, az az  $n$ -komponensű vektor, melynek koordinátái a  $\frac{\partial \Phi(\mathbf{x})}{\partial x_j}$ ,  $j = 1, 2, \dots$   $n$  parciális deriváltak.
20.  $N(\mathbf{A})$ : Az  $\mathbf{A}$  mátrix magtere vagy nulltere. Azon  $\mathbf{x}$  vektorok tere, amelyekre  $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$  teljesül.
21.  $R(\mathbf{A})$ : Az  $\mathbf{A}$  mátrix képtere, tehát az összes  $\mathbf{Ax}$  alakú vektorok vektortere.
22.  $\rho(\mathbf{A})$ : Az  $\mathbf{A}$  mátrix spektrálsugara, tehát a legnagyobb abszolút értékű sajátérték abszolút értéke.

# BEVEZETÉS

## A TUDOMÁNYOS PROBLÉMA MEGFOGALMAZÁSA

Napjainkban a terepi körülményeknek leginkább megfelelő, egyszerűen kezelhető, robusztus 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.

Az egyes lehetséges NATO forgatókönyvek: nukleáris berendezések szennyezettsége, radioaktív anyagok környezetbe való kijutása, kibocsátása, kezdetleges nukleáris eszközök ellenőrzése, zárt sugárforrások ellenőrzése, nukleáris fűtőelemek és szegényített urántartalmú termékek valamint lumineszkáló katonai eszközök ellenőrzése során a potenciálisan veszélyeztetett és/vagy misszióban közreműködő katonai erők sugárvédelme szempontjából, alapvetően fontos feladat a környezet folyamatos és gyors ellenőrzése. A megfelelő parancsnoki döntés előkészítéséhez a feladat kiterjed a környezeti külső dózisterhelés gyors és izotópszelektív kimutatására is. Ezeknek a technikáknak a fejlesztése és rendszerbe állítása a Magyar Honvédség ABV védelmi képességének növelése szempontjából is alapvetően fontos.

Az újabban előtérbe került, nem a hagyományos csúcskeresési algoritmusokon alapuló dekonvolúciós technikák ígéretesek lehetnek a feladat megoldására. Ezen technikák célja, hogy felhasználva a matematika különböző területeinek apparátusát, kiaknázzák a modern személyi számítógépek adta lehetőségeket. A szcintillációs mérőműszerek ilyen irányú vizsgálata tehát elsősorban matematikai módszereket igényel. Egyre inkább elterjedőben van a lineáris algebra apparátusát használó, mátrixreprezentációs leírás de a matematika számos egyéb fejezete is sikerrel alkalmazható. A fizikában, a gamma-csillagászatban és nem utolsósorban az orvostudományban már alkalmaznak ezen problémakör megoldásához különböző módszereket. Így például a lineáris algebra direkt egyenletrendszer-megoldó módszereit, közelítő eljárásokat, klasszikus és továbbfejlesztett iterációs módszereket, a matematikai programozás témaköréhez tartozó nemlineáris, kvadratikus optimalizálási eljárásokat, az információelmélet és a statisztikus

fizika apparátusához tartozó maximum-entrópia módszert, a valószínűségelméletből a maximális valószínűség becslésének módszerét. A módszerek hatékonyságának javítása érdekében az idősorok analízisében és a képelemzésben hatékonyan alkalmazott Fourier-transzformációt illetve az ezeket megvalósító, numerikus számításokhoz szükséges algoritmusokat.

## **KUTATÁSI CÉLKITŰZÉSEK**

Kutatási cél a „szcintillációs detektor & hordozható személyi számítógép” mint eszközrendszer használhatóságának, tulajdonságainak vizsgálata, a hatékonyság fejlesztése, az alkalmazási kör kiterjesztése, új kiértékelési algoritmusok kidolgozása elsősorban szcintillációs gamma spektrumok vizsgálata érdekében. Cél az előző pontban részletezett technikák, matematikai módszerek továbbfejlesztése, új módszerek alkalmazása, összehasonlító vizsgálata és adaptálása a katonai alkalmazások területére. Elsőrendű cél továbbá, hogy a Magyar Honvédség vegyivédelmi és katasztrófaelhárító egységeinek birtokában legyen egy olyan szoftverrendszer, amelynek alkalmazásával a parancsnokok kellően rövid idő alatt a szükséges információk birtokába juthatnak a szükséges döntések meghozatala érdekében. Végül de nem utolsó sorban cél az is, hogy a Zrínyi Miklós Nemzetvédelmi Egyetem szakirányú képzési rendszerében a hallgatók is hozzájuthassanak ezekhez az ismeretekhez és a képzésük során alkalmazzák is azokat. Egyszerűen összefoglalva tehát cél az, hogy egy szcintillációs detektorral – elsősorban terepi körülmények között – felvett spektrumból, egy hordozható számítógép segítségével a helyszínen a lehető legtöbb információt megkapjuk, minél rövidebb idő alatt.

## **KUTATÁSI MÓDSZEREK**

A kutatási módszereket illetően mindenekelőtt természetesen alapvető fontosságú, hogy birtokunkban legyen számos, szcintillációs detektorral felvett valós spektrum, amelyeken a vizsgált algoritmusok illetve ezek számítógépes implementációja tesztelhető, illetve a különböző módszerek hatékonysága összehasonlítható. A ZMNE BJKMK ABV-, Katasztrófavédelmi és Védelmi-Igazgatási Tanszéke rendelkezik felszerelt laboratóriummal, ahol rendelkezésre állnak szcintillációs gamma detektorok, továbbá radioaktív izotópokat tartalmazó etalonsor, melyek segítségével felvehetők valós gamma spektrumok. Továbbá a HM Görgey Artúr Vegyivédelmi Információs Központ Havária Laboratóriuma is rendelkezik további két – az előbbitől különböző – szcintillációs detektorral, melyeket kifejezetten terepi körülmények között alkalmaznak, valamint ezekhez is tartozik radioaktív izotópokat tartalmazó etalonsor, amely utóbbi tartalmaz olyan izotópokat, melyek az Egyetem szaktanszékén nem találhatóak meg. Kutatómunkám során mindkét laboratóriumban volt lehetőségem spektrumok felvételére, összesen mintegy 60

szcintillációs gamma-spektrumot rögzítettem. Ezek között vannak olyanok, amelyek egyetlen radioaktív izotóptól származnak, de vannak olyanok is amelyek 2 vagy 3 izotóp együttesének spektrumát tartalmazzák. (Ennél több izotóp együttese által szolgáltatott spektrum vizsgálata már nem tartozik a vizsgálatok tárgyához. Ugyanis a szcintillációs detektorok ilyen esetekben – szerkezetüknél fogva –, relatíve gyenge energiateljesítményük miatt egyszerűen alkalmatlanok. Egyszerre „sok” izotóp spektrumának vizsgálatára – lényegesen jobb energiateljesítményük miatt – félvezető detektorokat alkalmaznak, de ezek használata körülményes, terepi körülmények között szóba sem kerülhet, kizárólag laboratóriumi viszonyok között használhatóak.) Kutatómunkám során ezen valós spektrumok vizsgálata jelentette az algoritmusok használhatóságának bizonyítékát.

Meg kell jegyeznünk, hogy a detektorokhoz és a felvett spektrumok vizsgálatához mind az Egyetem említett tanszéke, mind a Havária Laboratórium rendelkezik kiértékelő szoftverrel, azonban ezek a szoftverek mind az ún. „hagyományos csúskeresési eljárás” algoritmusán alapulnak (hogy ez pontosan mit jelent, az kiderül az I. fejezetből). A célok között éppen ez az egyik legfőbb feladat, hogy ezeket a szoftvereket kiegészítsük olyan algoritmusokkal illetve ezek MATLAB-implementációjával, amelyek elviekben különböznek a klasszikus módszertől, így a probléma hagyományostól eltérő, gyökeresen más megoldását adják.

A módszereket tovább sorolva, további fontos szempont a szakirodalom tanulmányozása két vonatkozásban:

Egyrészt a matematika egymástól független területeinek tanulmányozása abból a szempontból, hogy melyek azok az apparátusok, amelyek a fent vázolt és az I. fejezetben részletesen bemutatott matematikai probléma megoldására sikerrel alkalmazhatóak. Itt lényegesnek tartom hangsúlyozni azt, hogy „több” és „független”, a következők miatt. A rendelkezésemre álló izotópok száma korlátozott volt (az 5. melléklet egy táblázat, amely a felhasznált izotópok lényeges tulajdonságait tartalmazza), az általam javasolt algoritmusokat minden egyes detektor által felvett spektrumok esetében teszteltem, de az algoritmusok lehetséges alkalmazási területe ettől sokkal szélesebb körű. Ezért döntöttem úgy, hogy a matematika egymástól teljesen független fejezeteinek apparátusát felhasználva szerkeszték algoritmusokat, annak érdekében, hogy egy-egy spektrum kiértékelését több algoritmus alkalmazásával is el lehessen végezni és az eredményeket összehasonlítani, ugyanis az elmélet nem korlátozódik kizárólag „spektrumok” vizsgálatára. Továbbá az a cél is vezérelt, hogy reményeim szerint ezek az algoritmusok valamilyen szinten helyet kapnak majd a tisztai képzésben is, és mivel ezen algoritmusok matematikai háttere nem minden esetben magától értetődő, sőt egyik-másik bonyolultnak mondható, a hallgatók is találhatnak majd legalább egyet közöttük, amelyet megérthetnek.

A matematikai sokrétűségnek van egy másik oka is, mégpedig az, hogy az értekezésben vizsgált algoritmusokat nem kizárólag szcintillációs gamma-spektrumok kiértékelésére lehet alkalmazni, hanem számos olyan probléma megoldására, amely – elvonatkoztatva a konkrétumoktól – ugyanarra a matematikai problémára vezet. Az „Ajánlások” című pontban részletesebben utalok majd az alkalmazási lehetőségekre, egymástól „idegen” tudományterületeken. Mivel ezek a problémák mind más jellegűek lehetnek, nem biztos, hogy minden algoritmus működik, de elképzelhető, hogy némi módosítással, egyik-másik sikerrel alkalmazható.

Másrészt a kutatómunkámnak legalább ilyen fontos része volt a témakörrel foglalkozó szakirodalom tanulmányozása, ahol elsősorban nem „szakkönyv”-ekre gondolok, 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 katonai alkalmazások szempontjából megfelelő.

Egy-egy módszer kidolgozása során több szempont is szem előtt tartható. Egyrészt lehet cél a jó felbontás, hogy a közeli, átfedő csúcsokat szeparálhassuk, más esetben a gyors algoritmus lehet a fontosabb, de cél lehet a matematikai eljárások egyszerűsítése is, hiszen akik majd használják, nem árt, ha meg is értik a módszer lényegét, mielőtt alkalmazzák, hiszen – mint majd látható –, egyik-másik eljárás igen bonyolult matematikai háttérrel bír. Ezen oknál fogva, és mert elsősorban a számítógépes implementáció, tehát a numerikus forma a döntőbb, nem mindig törekedtem például egy-egy probléma kapcsán az analitikus formák alkalmazására vagy „kierőszakolására”, mert erre jelen esetben nem biztos, hogy szükség van, hanem megelégedtem az egyszerűbb diszkrét megközelítéssel, amely a problémához egyébként sokkal jobban illeszkedik.

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 mátrixt alkalmaztam. Ennek érdekében szerkesztettem egy egyszerű Monte-Carlo algoritmust, amellyel szimulálni lehet a valós spektrumokban tapasztalható fluktuációkat. Mivel korlátozott számú izotóp spektrumát tudtam csak mérésrel felvenni, az interneten elérhető spektrumgeneráló weboldalon ([www.nucleonica.net](http://www.nucleonica.net)) előállított spektrumokat is használtam a vizsgálatokhoz és csak ezek után következett az algoritmusok valós spektrumokra történő alkalmazása.



# I. FEJEZET: SZCINTILLÁCIÓS GAMMA-SPEKTRUMOK KIÉRTÉKELÉSÉVEL KAPCSOLATOS KÉRDÉSEK ÉS PROBLÉMÁK ÁTTEKINTÉSE

## I.1. A SPEKTRUMKIÉRTÉKELÉS MINT MATEMATIKAI PROBLÉMA

A gamma sugárzás természetével és a szcintillációs gamma spektrumok keletkezésével és sajátásaival kapcsolatos legfontosabb ismeretek, illetve a problémakör részletes tárgyalása megtalálható az [1-9] kötetekben.

Az általam vizsgált problémakörben az egyik legalapvetőbb feladat a szcintillációs detektorral felvett spektrumból, tehát a mérési adatokból visszakövetkeztetni a valós adatokra, a tényleges spektrumra. Hangsúlyozom, hogy a spektrum a hagyományos értelemben vett differenciális spektrum. A mérendő energiatartományt felosztjuk részintervallumokra, a spektrum tulajdonképpen megadja az egyes intervallumokban a beütésszámot. Mivel azonban a részintervallumok hossza nem zérus, hanem néhány keV, tehát pozitív szám, az analízátor összeadja az ebben az intervallumban észlelt fotonok számát. Így spektrumként egy hisztogramot kapunk. Ebben az értelemben tehát „integrális” a spektrum.

A mérőeszköz szerkezeti felépítése, a véges energiafelbontás, az analízátor sáv szélessége mind torzítják a  $\gamma$ -forrás valódi spektrumát. Egy-egy spektrumvonalat a detektor nagyjából egy-egy Gauss-görbére képez le. Ha ezek a spektrumvonalak nagyon közel vannak egymáshoz, az energiakülönbség nagyon kicsi, a Gauss-görbék egybemosódnak. Más szavakkal fogalmazva egy-egy jelfelvillanás a detektorban kiszélesedő jeleket eredményez amelyek átfedik egymást, egybeolvadnak, és a kiszélesedés miatt a mérendő amplitúdó is eltolódik. A detektorral nem lehet tökéletesen felbontani a sugárzás spektrumát, és ezen felül a mérést zavarja a  $\gamma$ -spektrum bonyolult szerkezete és a mérőeszköz korlátai.

Rátérve a probléma matematikai szempontból történő elemzésére, **dekonvolúciós** eljárásoknak nevezzük azokat a módszereket, amelyek segítségével a méréssel kapott spektrumból visszakövetkeztetve meghatározzuk a  $\gamma$ -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  $\mathbf{r} \in \mathfrak{R}^m$  vektornak a konvolúciója, ahol „m” a detektor csatornáinak a száma. Mivel a detektorhoz csatlakozó analízátor véges sok csatornában dolgozza fel a jeleket, a kimenő jelsorozatot, az  $y(1), y(2), \dots, y(m)$  nem negatív valós számokat egy diszkrét vektornak tekinthetjük. Jelölje ezt a vektort  $\mathbf{y} = [y(i)]_{i=1, \dots, m}$ . A számítandó impulzusokat pedig jelölje az  $\mathbf{x} = [x(j)]_{j=1, \dots, n}$  vektor. A két vektor komponenseinek kapcsolatát az alábbi összefüggés írja le:

$$y(i) = \sum_{j=0}^n x(j)r(i-j); i = 1, 2, \dots, m. \quad (1.1)$$

ami nem más mint az  $\mathbf{x}$  vektornak és az említett  $\mathbf{r}$  vektornak a konvolúciója. Minden egyes energia intervallumhoz tartozik egy  $\mathbf{r}$  vektor, ezekből képezve egy  $m \times n$  méretű  $\mathbf{R}$  mátrixot, az előbbi koordinátákkal adott összefüggést egyetlen mátrixszorzással lehet reprezentálni:

$$\mathbf{y} = \mathbf{R}\mathbf{x} \quad (1.2)$$

ahol az  $\mathbf{R}$  mátrix a detektor **válasz mátrixa**, 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**. Ebből az egyenletből az  $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$  vektor – tehát a valós spektrum – meghatározását nevezzük dekonvolúciós eljárásnak. A dekonvolúció akkor oldható meg eredményesen, ha magát az  $\mathbf{R} \in \mathfrak{R}^{m \times n}$  válasz mátrixot ismerjük. Ennek a kérdéskörnek a részletes vizsgálata az V. fejezetben található. Azonban pusztán az  $\mathbf{R}$  függvény ismerete messze nem elégséges az eredményes megoldáshoz.

A módszerek mind azt célozzák, hogy a  $\mathbf{y} = \mathbf{R}\mathbf{x}$  lineáris egyenletrendszert megoldják az  $\mathbf{x}$  vektorra vonatkozólag az  $\mathbf{y}$  és  $\mathbf{R}$  ismeretében. Alapvetően tehát egy lineáris algebrai problémával állunk szemben. A gyakorlatban az  $m$  csatornaszám általában 2-hatványa, tipikusan 256, 512, 1024, vagy akár 2048. Ha például  $m = 1024$ , akkor a mátrixnak 1024 sora van, az egyenletrendszerben 1024 db egyenlet van. A sorok száma általában nagyobb, mint az oszlopok száma, egy sugárforrás nem bocsát ki 1024 különböző energiájú fotont, a rendszer tehát túlhatározott. Ellentmondást nem tartalmazhat, így végtelen sok megoldása kell, hogy legyen. A probléma az, hogy ebből a végtelen sok megoldásból, hogyan választjuk ki azt, amelyik a legjobban megfelel a valós spektrumnak.

Amint az ebből a bevezetőből kiderült, a megoldandó feladat lineáris algebrai probléma, és mint kiderül a lineáris algebra igen sok fejezetet átölelő apparátusát fogom felhasználni a kitűzött feladat megoldására. A témában járatlan olvasó számára a témakört részletesen tárgyaló [10-17] munkákat javaslom áttekintésre.

Az egyenletrendszer megoldása lényegében egy inverz-probléma. Abban az esetben, ha az  $\mathbf{R}$  mátrix kvadratikus ( $\mathbf{R} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ ) és reguláris, a megoldás azonnal megkapható:  $\mathbf{x} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{y}$ . Ez a gyakorlatban sohasem teljesül. Mivel az  $\mathbf{R}$  mátrix általában nem kvadratikus, így nem létezik közvetlenül inverze, ezen túlmenően az oszlopvektorok nem lineárisan függetlenek, azaz  $\rho = r(\mathbf{R}) < n$ , ami azt jelenti, hogy ha van megoldás az nem egyértelmű, végtelen sok megoldás közül kell kiválasztani a legmegfelelőbbet. Ezen kívül az  $\mathbf{y} \in \mathfrak{R}^m$  mérési eredmények hibával

terheltek, az inverz probléma megoldását a hibás  $\mathbf{y}^\delta \in \mathfrak{R}^m$  vektorból kell meghatározni, és mint látni fogjuk a gyakorlatban előforduló esetekben a dekonvolúció nagyon érzékeny a hibákra.

Az  $\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  ( $\mathbf{R} \in \mathfrak{R}^{m \times n}$ ) inverz feladatban az  $\mathbf{R}$  mátrix általában nem kvadratikus, de ha a mérést úgy hajtjuk végre, hogy  $m = n$  legyen, a tapasztalat szerint  $\mathbf{R}$  akkor sem reguláris, és nem is szimmetrikus. Hogy invertálni lehessen a problémát, szorozzuk meg az egyenlet mindkét oldalát balról az  $\mathbf{R}^* \in \mathfrak{R}^{n \times m}$  transzponált mátrixszal. Ekkor kapjuk az

$$\mathbf{R}^* \mathbf{R} \mathbf{x} = \mathbf{R}^* \mathbf{y}; \quad (1.3)$$

**Gauss-féle normálegyenletet** ( $\mathbf{R}^* \mathbf{R} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ ). Itt az együtthatómátrix már kvadratikus, sőt a képzésből adódóan szimmetrikus és pozitív szemidefinit [10]. Ez indokolja, hogy vizsgálatainkban külön hangsúlyt fektetünk a szimmetrikus, pozitív szemidefinit mátrixokra. Ugyanakkor hangsúlyozzuk a pozitív definit mátrixok szerepének fontosságát is, hiszen a hatékony algoritmusok, az elméletben szereplő konvergencia tételek szinte kivétel nélkül pozitív definit mátrixokra vonatkoznak. Alkalmazzuk az  $\mathbf{A} = \mathbf{R}^* \mathbf{R} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$  és az  $\mathbf{y}' = \mathbf{R}^* \mathbf{y}$  egyszerűsítő jelöléseket. Ezzel a megoldandó egyenletrendszer az  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}'$  alakot – és mivel ez nem okoz semmiféle félreértést, a továbbiakban  $\mathbf{y}'$  helyett  $\mathbf{y}$ -t írunk –, illetve az  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  alakot ölti. Itt szeretném hangsúlyozni, hogy mivel az  $\mathbf{A}$  mátrix mindenképpen kvadratikus, továbbá semmiféle fizikai vagy matematikai oka nincs annak, hogy  $n$  és  $m$  különbözőek legyenek, a továbbiakban minden esetben úgy dolgozunk, hogy  $n = m$ , azaz már az  $\mathbf{R}$  válasz mátrix is kvadratikus legyen.

Az  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  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?

Ez utóbbi jellemző nagyon fontos, mert ha hibás adatokból határozzuk meg a megoldást, akkor felmerül a kérdés, hogy hogyan öröklődik a mérés hibája a megoldásra. Ha egy matematikai probléma teljesíti ezt a három kívánalmat, akkor azt „jól kitűzött”, „jól megfogalmazott” („well-posed”), ha valamelyik tulajdonság nem teljesül, akkor „rosszul kitűzött”, „rosszul megfogalmazott”, „rosszul kondicionált” („ill-posed”) matematikai problémának nevezzük. Mint alább kiderül a spektrumok esetében felmerülő inverz probléma teljesíti az 1. és 2. kitélt, de nem teljesül a 3. kívánalom. Sajnos ennek az inverz problémának a megoldása nagymértékben érzékeny a hibákra – ezt hamarosan illusztrálom is –, így elkönnyelhetjük, hogy a megoldandó feladat egy „ill-posed”, „rosszul kondicionált” feladat.

Jelen értekezés legfőbb témája éppen az, hogy olyan algoritmusokat mutasson be amelyek alkalmasak rosszul kondicionált rendszerek numerikus módszerekkel történő stabilis, tehát a hibákra kevésbé érzékeny megoldására. Mivel a dolgozat fő témája a problémakör numerikus matematikai vizsgálata, fontosnak tartom megvilágítani a kérdést matematikai formulákkal is. A kérdéskör részletes vizsgálata megtalálható a [18-29] kötekeben illetve cikkekben, itt csak a legfontosabb kérdésekre térünk ki.

Elsőként az  $\mathbf{A}$  normájának fogalmát használva becslést adok a megoldás relatív hibájára vonatkozólag. Tegyük fel átmenetileg, hogy  $\mathbf{A}$  reguláris, továbbá  $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$  és a mérési hiba  $\delta\mathbf{y}$ , azaz  $\mathbf{y}^\delta = \mathbf{y} + \delta\mathbf{y}$ . Az  $\mathbf{y} + \delta\mathbf{y}$ -hoz tartozó megoldás legyen  $\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}$ . Tehát  $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$  és  $\mathbf{A}(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = \mathbf{y} + \delta\mathbf{y}$  valamint a linearitás miatt  $\mathbf{A}\delta\mathbf{x} = \delta\mathbf{y}$ . Ekkor egyrészt teljesül, hogy  $\|\mathbf{y}\| = \|\mathbf{Ax}\| \leq \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{x}\|$ , másrészt pedig  $\|\delta\mathbf{x}\| = \|\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \|\delta\mathbf{y}\|$ . E két egyenlőtlenség egybevetéséből azt kapjuk, hogy

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \frac{\|\mathbf{A}^{-1}\| \|\delta\mathbf{y}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \frac{\|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{A}\| \|\delta\mathbf{y}\|}{\|\mathbf{y}\|} = \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{A}\| \frac{\|\delta\mathbf{y}\|}{\|\mathbf{y}\|} \quad (1.4)$$

Mint látható a megoldás relatív hibájának függése a mérési hibától az  $\|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \|\mathbf{A}\|$  szorzat értékétől függ. Ezt a szorzatot az  $\mathbf{A}$  mátrix **kondíciószámának** nevezzük és  $\kappa$ -val ill.  $\text{cond}(\mathbf{A})$ -val jelöljük:  $\kappa = \|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \|\mathbf{A}\|$ . Innen következik, hogy

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \kappa \frac{\|\delta\mathbf{y}\|}{\|\mathbf{y}\|} \quad (1.5)$$

ami azt jelenti, hogy a megoldás relatív hibája a kondíciószámtól függ, a mérés relatív hibájának  $\kappa$ -szorosára növekedhet. Be lehet bizonyítani, hogy a kondíciószám soha nem lehet kisebb, mint 1, tehát  $\kappa \geq 1$ , ami azt jelenti, hogy a megoldás relatív hibája nem lehet kisebb mint a mérés relatív hibája [18]. Az olyan mátrixot melyekre vonatkozólag a kondíciószám nagy, rosszul kondicionált mátrixnak nevezzük. Tegyük most fel, hogy a mérés relatív hibája  $\|\delta\mathbf{y}\|/\|\mathbf{y}\| = 10^{-k}$ . Legyen a kondíciószám  $\kappa = 10^n$ . Ekkor  $\|\delta\mathbf{x}\|/\|\mathbf{x}\| = 10^{n-k}$ , tehát  $n = \lg\kappa$  azon decimális jegyek száma, amelyet elveszítünk, ha hibás jobboldallal számolunk.

A kondíciószám a sajátértékkel is szoros rokonságban áll. Bebizonyítható [10, 18], hogy szimmetrikus mátrix esetében

$$\kappa = \|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \|\mathbf{A}\| = \left| \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \right| \quad (1.6)$$

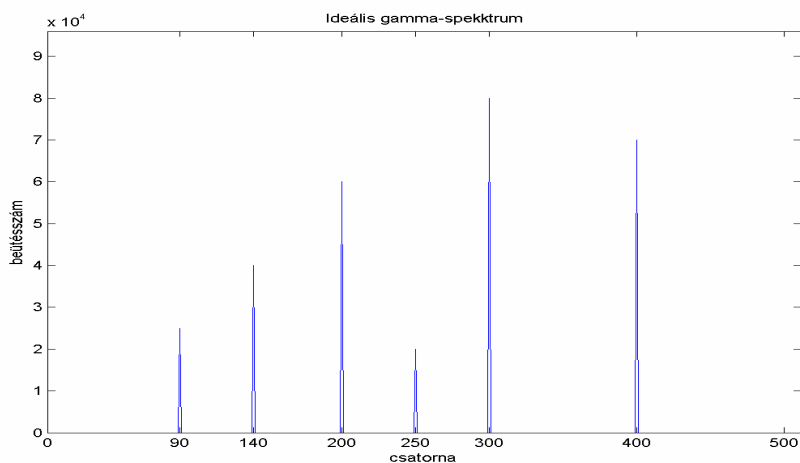
tehát a kondíciószám a maximális és minimális sajátérték hányadosának abszolút értéke. Pozitív definit mátrixok esetén, pedig egyszerűen a maximális és minimális sajátérték hányadosa. A kondicionáltság a sajátértékek nyelvén még könnyebben és szemléletesebben megfogalmazható.

Rosszul kondicionált az  $\mathbf{A}$  szimmetrikus, pozitív definit mátrix, ha a  $\lambda_{\max}/\lambda_{\min}$  hányados nagyon nagy, ami – a gyakorlatot tekintve – elsősorban akkor következik be, amikor a mátrixnak nullához közel eső sajátértékei vannak. Megfogalmazhatjuk tehát, hogy a problémát az adott kérdéskörben, a nagyon kicsi, nullához közeli sajátértékek okozzák.

A II. fejezetben az inverz probléma megoldására alkalmazunk ún. regularizációs módszereket, amelyek során az  $\mathbf{A}$  mátrixot változtatjuk meg  $\delta\mathbf{A}$ -val. A regularizáció kérdéskörét részletesen tárgyalják a [30-36] cikkek, jelen értekezésben a [36] dolgozatban részletesen kifejtett módszereket alkalmazom. Szintén fontos kérdés, hogy ez a változtatás milyen hatással van a megoldásra. Bizonyítható [10,16], hogy a relatív hiba az alábbiak szerint alakul:

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} = \frac{\|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \|\mathbf{A}\| \cdot \frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}{1 - \|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \|\mathbf{A}\| \cdot \frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}} \quad (1.7)$$

Amint látható a megoldás relatív hibája ebben az esetben ugyancsak a kondíciós szám függvénye. Abban az esetben amikor kénytelenek vagyunk megváltoztatni az  $\mathbf{A}$  mátrixot annak érdekében, hogy a valós spektrumhoz közel eső megoldást kapjunk, a változtatás mértékének megválasztásakor ezt a formulát mindenképp szem előtt kell tartani.



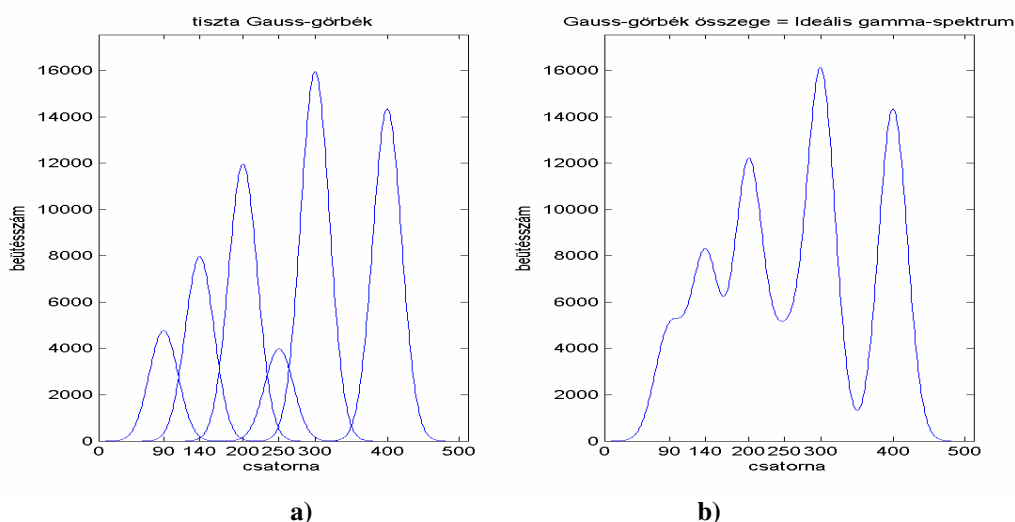
I.1. ábra. 6 vonalból álló ideális gamma spektrum

Pozíció(≈energia)	90	140	200	250	300	400
Beütésszám	25000	40000	60000	20000	80000	70000

I.1. táblázat. Az ideális gamma-spektrum adatai

Jelen dolgozat legnagyobb és leghangsúlyosabb része olyan algoritmusok kidolgozásáról és ezek bemutatásáról szól, amelyek eredményesen alkalmazhatóak nagy méretű mátrixszal adott, rosszul kondicionált, lineáris rendszerek megoldására. Mielőtt alkalmaznám az eljárásokat valós,

mért spektrumokra, a problémát tisztán matematikai problémaként fogom kezelni, mesterségesen generált spektrum és válasz mátrix alkalmazásával. Minden vizsgált algoritmust először ezeken a tisztán matematikai objektumokon fogom tesztelni. Hogy bemutassam konkrétan a problémát matematikai oldalról, elsőként generálok egy ideális gamma spektrumot, amely 6db monoenergiás vonalból áll. Az I.1. ábra mutatja a spektrumot, amely más szavakkal 6db Dirac-féle delta függvényből áll. A spektrum adatai – pozíció és beütésszám – megtalálhatóak az I.1. táblázatban.

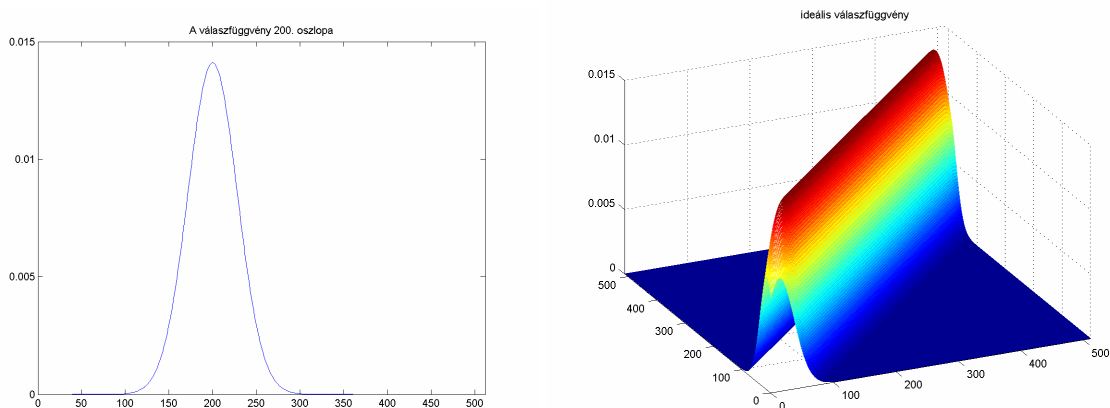


I.2. ábra. a) A detektor ideális spektrumra adott impulzus válaszai; b) a „mért” spektrum

A detektor válasza ezekre az impulzusokra – a fentiekben részletezett okok miatt – ideális Gauss-görbék összege. Az I.2.a) ábra mutatja az egyes impulzus válaszokat külön-külön, a b) ábra pedig ezek összegét, amelyet „mért” spektrumként érzékelünk. Azért választottam ilyen pozíciókat és beütésszámokat, mert ahogyan a b) ábrán látható, ezek között van olyan csúcs amely teljesen láthatatlan, elnyomják a szomszédos intenzív csúcsok, és van olyan amelyik részben beleolvad a szomszédos csúcsba. A kidolgozandó algoritmusokkal szemben alapvető követelmény, hogy ezeket a részben illetve teljesen elfedett csúcsokat is megadják megoldásként, egészen pontosan azt tűzöm ki célul, hogy az eljárások az I.1. ábrán látható spektrumot adják eredményül.

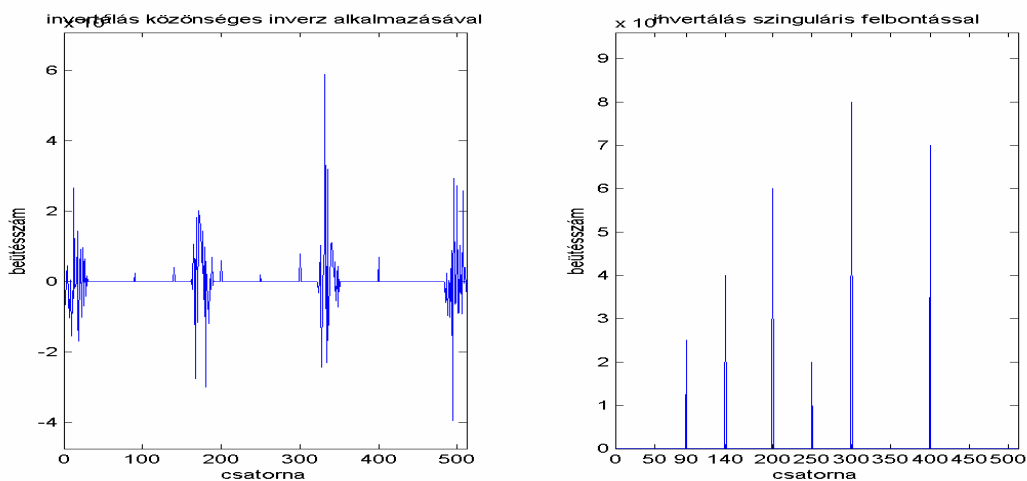
A probléma megoldásához rendelkezniünk kell a detektor válasz mátrixével. Ezt is a fenti konvenciók szerint ideális Gauss-görbékből állítjuk össze. Ennek a matematikai idealizációnak a fizikai háttere az, hogy ha a detektorban a kristály elég nagy – ideálisan végtelen nagy –, akkor a Compton-effektustól eltekinthetünk, azaz a Compton-tartomány 0-magasságú. Ha továbbá az árnyékolás elég távol van a kristálytól, akkor nincs visszaszórási csúcs, stb. Tehát az ideális válasz mátrix, ideális fizikai körülményeket jelent a gyakorlatban. A válasz mátrixnek, tehát az  $\mathbf{R}$  mátrixnak egy oszlopa – adott esetben a 200. oszlopa –, és maga az  $\mathbf{R}$  mátrix látható rendre az I.3. a) és b) ábrán.

A gyakorlatban (V. fejezet) 256, 512 és 1024 csatornás analizátorokkal rendelkező detektorokkal felvett spektrumokkal dolgozom majd [1-3. melléklet]. Egy közbülső megoldásként most egy 512 csatornás detektor válasz mátrixét idealizáltam, ezzel fogom a II. fejezetben tesztelni az algoritmusokat. A másik két eset elméletileg nem különbözik ettől, csak a számítások mennyiségében van különbség.



a) a) A válasz mátrix 200. oszlopa; b) (512×512) méretű válasz mátrix;

Most már kezünkben van a válasz mátrix és a „mért” spektrum. Kíséreljük meg az (1.3) Gauss-féle normálegyenlet megoldását. Első gondolat – tekintettel arra, hogy az  $A = R \cdot R$  mátrix kvadratikussá válik –, hogy alkalmazzuk a „közönséges” inverz mátrix fogalmát a rendszer megoldására, amikor tehát  $x = A^{-1} \cdot y$ . Ezzel a módszerrel kapott megoldást ábrázoltam az I.4. a) ábrán.



a) a) inverztálás közönséges inverz alkalmazásával; b) inverztálás szinguláris felbontással

Mint látható a megoldásnak semmi köze nincs a spektrumhoz, számos negatív komponense van és erősen oszcilláló. Kijelenthetjük tehát, hogy az inverz mátrix fogalma a probléma megoldására teljesen alkalmatlan. Ennek oka, a rossz kondicionáltság. Az adott esetben az  $A$

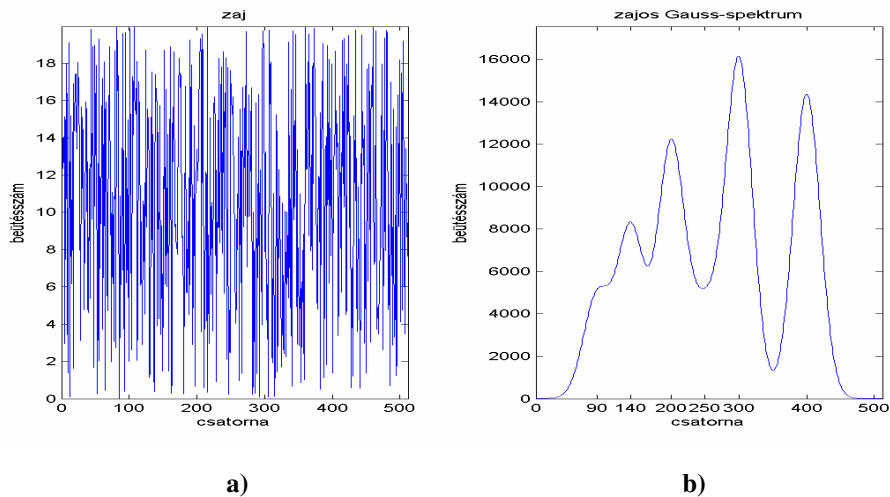
mátrix kondíciószáma  $\text{cond}(\mathbf{A}) = 1,8578 \cdot 10^{18}$ , ami nagyon nagy szám. Ennek reciproka  $\text{Rcond}(\mathbf{A}) = 2,8570 \cdot 10^{-19}$ , csaknem zérus, ami azt jelenti, hogy a mátrix „majdnem” szinguláris. Ezért nem hatékony ebben az esetben a mátrix invertálásának módszere. Egyébként a MATLAB figyelmeztet is bennünket erre: „Az  $\mathbf{A}$  mátrix rosszul kondicionált, a megoldás megbízhatatlan”, és közli a kondíciószámot. Egyébként ez teljesen érthető is ha figyelembe vesszük a MATLAB számításainak pontosságát: „eps” =  $2,2204 \cdot 10^{-16}$ . A reciprok-kondíciószám ennél 3 nagyságrenddel kisebb, figyelembe véve mármost az (1.5), (1.6) és (1.7) összefüggéseket, nem is várhatunk pontos és elfogadható megoldást.

Az inverz mátrix fogalmának létezik az általánosítása szinguláris, sőt nem kvadratikussá mátrixok esetére is [18-20]. Ezt az **általánosított inverzet** Moore–Penrose-féle inverznek nevezik és a hagyományos  $\mathbf{A}^{-1}$  helyett  $\mathbf{A}^+$  szimbólummal jelölik. Az előállítása az ún. **szinguláris felbontással** (röv.: SVD) történik. Eszerint tetszőleges  $\mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{m \times n}$  mátrix felírható  $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^*$  alakban ahol  $\mathbf{U} \in \mathfrak{R}^{m \times m}$ ,  $\mathbf{S} \in \mathfrak{R}^{m \times n}$ ,  $\mathbf{V} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ ,  $r(\mathbf{A}) = \rho$ . Ahol a  $\mathbf{V} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$  ortogonális mátrix oszlopvektorai az  $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$  mátrix sajátvektorai. Ha nem létezik  $n$  db lineárisan független sajátvektor, mert  $\rho < n$ , akkor Gram–Schmidt-féle ortogonalizációval kiegészítjük  $n$  db vektorból álló ortonormált rendszerré. Az  $\mathbf{U}$  oszlopvektorai az  $\mathbf{A}$  mátrix  $R(\mathbf{A})$  képterének ortonormált bázisát alkotják, hasonlóan kiegészítve  $m - \rho$  db ortonormált oszloppal a Gram-Schmidt ortogonalizációs eljárást alkalmazva. Végül pedig az  $\mathbf{S}$  Blokkokra bontott alakja  $\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_1 \\ \mathbf{S}_2 \end{pmatrix}$ , ahol  $\mathbf{S}_2 = \mathbf{0} \in \mathfrak{R}^{m-n \times n}$ ,  $\mathbf{S}_1 \in \mathfrak{R}^{n \times n}$  pedig olyan diagonális mátrix, melynek főátlójában a  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_\rho$  értékek, és  $n - \rho$  db zérus található. A  $\sigma_i$  valós számokat az  $\mathbf{A}$  mátrix **szinguláris értékeinek** nevezzük. A szinguláris értékek éppen az  $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$  mátrix sajátértékeinek négyzetgyökei:  $\{\sigma_i^2\} = \{\lambda_j(\mathbf{A}^* \mathbf{A})\}$ . A szinguláris felbontásra támaszkodva az általánosított inverz az  $\mathbf{A}^+ = \mathbf{V}\mathbf{S}^+\mathbf{U}^*$  formula szerint adódik.

Ha a Gauss-féle (1.3) egyenletrendszert az általánosított inverz alkalmazásával oldjuk meg az  $\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \mathbf{y}$  formula szerint – hangsúlyozottan **egzakt** Gauss-görbékből álló spektrum esetére –, akkor az I.4.b) ábrán látható megoldást kapjuk, ami tökéletesen megegyezik az I.1. ábra szerinti spektrummal. A szinguláris felbontás ebben az esetben eredményesen alkalmazható, és a MATLAB sem küld hibüzenetet.

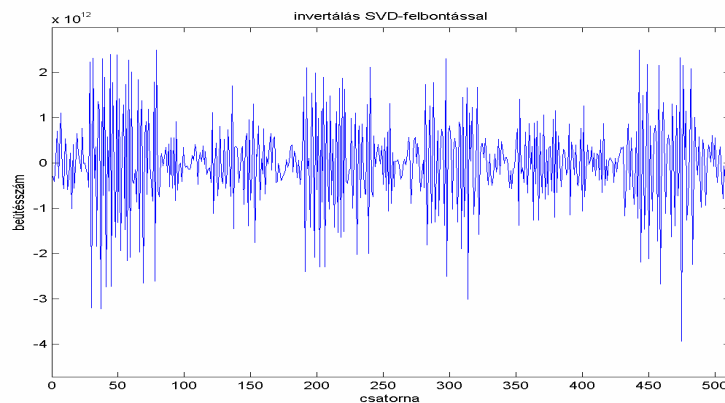
Azonban nem lehetünk elégedettek az eredménnyel, ugyanis a valós spektrumokat mindig terheli zaj. Előállítok most egy ilyen spektrumot. Ehhez véletlen szám generátorral szimulálunk minden csatornában zajt, amit hozzáadunk az egzakt Gauss függvények összegéből spektrumra. A MATLAB-ban ez a „rand” utasítással valósítható meg, amely egyenletes eloszlású véletlen számokat szolgáltat a  $[0, 1]$  intervallumban.





I.5. ábra. a) a zaj; b) az egzakt Gauss-spektrumnak és a zajnak az összege

Ezzel az a célunk, hogy ne egy sima görbét vizsgáljunk a dekonvolúció során, hanem modellezzük a detektálás folyamatában tapasztalható fluktuációkat. Így egy zajos spektrumot kapunk, amelynek a szerepe a további vizsgálatokban alapvető fontosságú. A II. fejezetben ismertetésre kerülő algoritmusokat mind ezen fogom majd tesztelni. A zaj és a zajos spektrum látható rendre az I.5. a) és b) ábrákon. A zaj nagyon csekély, az I.2. b) ábrát összevetve I.5. b) ábrával szemmel nem is érzékelhető eltérés. A megoldásban azonban igen jelentős különbség van. Ha a szinguláris felbontással kapott inverz mátrixot alkalmazzuk a zajos spektrum esetére, a dekonvolúció eredménye az I.6. ábrán látható.



I.6. ábra. Zajos spektrum Dekonvolúciója szinguláris felbontás közvetlen alkalmazásával

Az ábra alapján nyilvánvaló, hogy a probléma megoldására a szinguláris felbontás közvetlen alkalmazása is teljességgel alkalmatlan. A „dekonvolvált spektrum” fizikai szempontból értékelhetetlen, erősen oszcilláló, ugyancsak számos negatív komponenset tartalmaz, az eredeti spektrumra nem is hasonlít. Hangsúlyozom azonban, hogy ez az elméletileg nagyon nagy jelentőségű fogalom, más kontextusban, egy megfelelő iterációs környezetben eredményesen alkalmazható. Ezt majd bebizonyítom a II.3.2. pontban.

Ezzel a példával azonban rámutattunk a megoldandó feladat megoldásának matematikai nehézségeire, láttuk, hogy a megoldás milyen érzékeny módon függ a méréssel kapott spektrum hibájától. Az I.5.a) ábra mutatja a hiba intenzitását, ami jelen esetben nagyon kicsi, kevesebb mint 1%. Egyrészt azért nem alkalmaztam nagyobb mértékű hibát, hogy ezzel is érzékeltessem a rendszer hibára vonatkozó érzékenységet, másrészt pedig azért, mert a IV. fejezetben ismertetni fogok egy diszkrét Fourier-transzformáción alapuló eljárást a valós spektrumok simítására, a hiba intenzitásának csökkentésére.

## I.2. HAGYOMÁNYOS SPEKTRUM KIÉRTÉKELÉSI MÓDSZEREK

A hagyományos módszerek közül három eljárásnak a lényegét mutatom be. Elsőként a „**hagyományos csúcskeresési eljárást**”, majd az iteratív „**spectrum stripping**” módszert, végül a **második deriváltak** számítását.

1. A „**hagyományos csúcskeresési eljárás**” egy igen egyszerű gondolaton alapul. Ha ránézésre szeretnénk kiértékelni a mért spektrumot, akkor pillantsunk rá és keressünk benne karakteres, Gauss-görbére emlékeztető görbéket. Természetesen a számítógépnek is adhatunk ilyen utasítást, de ebben az esetben már óvatosabban kell eljárunk, mert a gép – ha tetszik – már bármely 3 pontra képes Gauss-görbét illeszteni, hiszen logaritmus egy másodfokú polinom. Azt sem szabad elfelejtenünk, hogy a detektorban és az elektronikus rendszerben végbemenő sztochasztikus folyamatok során statisztikus véletlenszerűséggel is kialakulhatnak Gauss-görbére emlékeztető részletek és ha ezeket is kiértékeljük igencsak félrevezető eredményt kapunk. Ha azonban feltesszük, hogy ez nem történik meg, és kizárólag valós Gaussokat vizsgálunk, akkor ezeket úgy tekintjük mintha foto-csúcsok lennének. Ezzel azonban van egy kis probléma. Előfordulhat, hogy egy szcintillációs spektrumban akár 4 karakteres Gauss-eloszlás is található: foto-csúcs, visszaszórás csúcs, kiszökési csúcsok, nem is beszélve arról az esetről, amikor egyszerre több izotóp, több különböző energiájú sugárzást bocsát ki, különböző aktivitással. Ekkor egymásra tevődnek ezek a spektrumok, igen sok Gauss-eloszlás szerepel az összetett spektrumban, amelyek összeadódnak. Egyes fotocsúcsok eltakarhatják más, kisebb aktivitású izotópok foto-csúcsát, vagy ha közel vannak egymáshoz egybeolvadnak, két csúcs egynek mutatkozik. A magas Compton-tartomány is eltakarhat kis intenzitású foto-csúcsot, ha az a nagyobb energiájú sugárzás Compton-platójánál kisebb energiájú. Előfordulhat, hogy megjelenik egyszeres vagy kétszeres kiszökési csúcs de ez nem látható előre, így ha megjelenik egy csúcs egy karakteres csúcstól „balra”, nem lehet biztosan tudni, hogy az egy visszaszórás csúcs, vagy egy másik izotóp teljes energia csúcsa, még akkor sem, ha az energiakülönbségük éppen a kiszökésnek megfelelő energia, és még sorolhatnánk a problémákat. Összefoglalva tehát kijelenthetjük, hogy a „hagyományos csúcskeresési eljárás” csak igen korlátozott körben

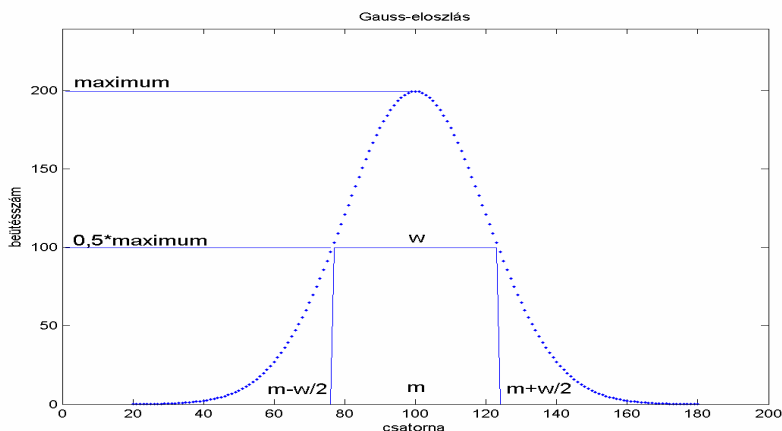
alkalmazható és nem alkalmazható 100% megbízhatósággal, különösen több izotóp együttes sugárzása esetén, de ugyebár ezt nem tudhatjuk előre a mérések során.

A kutatómunkám során három detektorral sikerült spektrumokat felvenni. (A három alkalmazott detektorról készült fényképek az 1-3. Mellékletek.) A gyártók mindhárom detektorhoz mellékeltek kiértékelő programot, ezek azonban mind ezt a bizonyos „hagyományos” módszert alkalmazzák. Ennek az értekezésnek éppen az a célja, ettől az eljárástól minőségileg különböző, sokkal hatékonyabb, nagyobb felbontású, megbízhatóbb algoritmusokat adjon a spektrumkiértékelők kezébe. Ezt többek között úgy valósítják meg ezek az algoritmusok, hogy a számítások során a mért spektrumból „eltüntetik” a Compton-tartományt, a visszaszórási csúcsot, a kiszökési csúcsokat, mindent, és kizárólag a foto-csúcsot adják eredményként. Több különböző elven működő, különböző hatékonyságú eljárást közlök majd, ezek vagy egy Gauss-görbét adnak majd megoldásként, vagy egy Dirac-féle delta függvényt. Az előbbi esetben szükséges az eloszlásfüggvény várható értékének és szórásának, illetve fél-érték szélességének ismerete. Ugyanis az előbbi a csúcs pozícióját, tehát a sugárzás energiáját adja, az utóbbi pedig a módszer felbontóképességét jellemzi majd, vagyis arról ad felvilágosítást, hogy milyen energiakülönbségű sugárzás foto-csúcsait lehet az adott módszerrel elkülöníteni. Fontossága miatt itt megvizsgáljuk ennek a kérdéskörnek a matematikáját.

Egy Gauss-féle eloszlási görbe az alábbi analitikus formulával írható le:

$$f(x) = \frac{N}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1.8)$$

Ez a valószínűség elméletben megszokott formulától abban különbözik, hogy nincs 1-re normálva. Ez természetes is ebben a problémakörben, a függvény alatti terület nem 1, hanem éppen a fotócsúcs körüli beütési szám, azaz N, amit szokás nettó csúcsterületnek nevezni. A formulában m jelöli a középértéket vagy várható értéket,  $\sigma$  jelöli a szórást és x a csatornaszám.



I.7. ábra. Gauss-féle eloszlási görbe a legfontosabb paraméterekkel

Az I.7. ábrán láthatunk egy ilyen eloszlási görbét,  $m = 100$ ,  $\sigma = 20$ ,  $N = 10000$  paraméterekkel. Az  $m$  középérték éppen a görbe szimmetriacentruma – ha  $m = 0$  akkor a függvény páros –, tehát szemléletes jelentésű, a  $\sigma$  szórás azonban nem az, helyette a fél-érték szélességet jelöltük meg, ezt használjuk az energiafelbontás mértékéül is. A kettő kapcsolatának megvilágításához vegyük tekintetbe, hogy a görbe maximuma  $\frac{N}{\sqrt{2\pi\sigma}}$ , a fél-érték szélesség a görbe szélessége ennek a felénél, tehát az  $\frac{1}{2} \cdot \frac{N}{\sqrt{2\pi\sigma}}$  ordinátánál, amelyet a függvény az  $m \pm \frac{w}{2}$  helyeken vesz fel.

Helyettesítsünk és oldjuk meg az

$$\frac{1}{2} \frac{N}{\sqrt{2\pi\sigma}} = \frac{N}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(w/2)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1.9)$$

egyenletet  $w$ -re. A megoldás, tehát a Gauss-eloszlás fél-érték szélessége a következő:

$$w = 2 \cdot \sqrt{2} \cdot \sqrt{\ln 2} \cdot \sigma \quad (1.10)$$

Numerikusan, közelítőleg ez a következőt jelenti:  $w \approx 2,3548 \cdot \sigma$ , illetve  $w/2 \approx 1,1774 \cdot \sigma$ .

A későbbiekben gyakran fogunk illeszteni Gauss-görbét a mérési eredményekre illetve a dekonvolvált spektrumra, annak érdekében, hogy meghatározhassuk az  $m$ ,  $\sigma$  és  $w$  paramétereket. Ennek módja a következő. Képezzük az (1.8) egyenlet logaritmusát.

$$\ln f(x) = \ln N - \ln(\sqrt{2\pi\sigma}) - \frac{(x-m)^2}{2\sigma^2} \quad (1.11)$$

Mint látható, ez egy másodfokú polinom az  $x$  változó függvényében. Rendezzük  $x$  hatványai szerint. Ekkor a következő adódik:

$$\ln f(x) = -\frac{1}{2\sigma^2} x^2 + \frac{m}{\sigma^2} x + \left\{ \ln N - \ln(\sqrt{2\pi\sigma}) - \frac{m^2}{2\sigma^2} \right\} \quad (1.12)$$

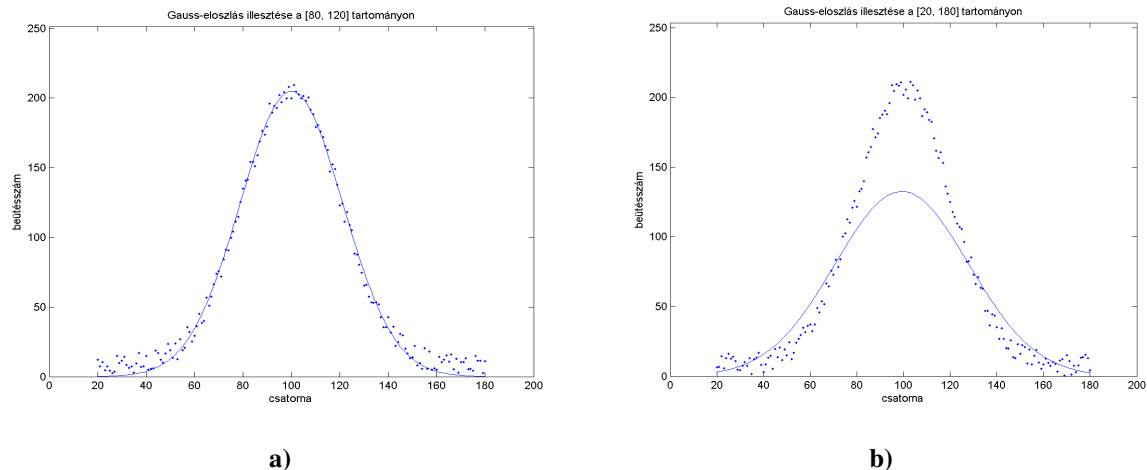
Az utolsó három tagot, amely együttesen a polinom konstans tagja, a nyomaték kedvéért tettük zárójelbe. Ezek szerint, ha van egy adatsor,  $y(x)$ , amelyre Gauss-eloszlást akarunk illeszteni, akkor képezzük a logaritmusát, és a legkisebb négyzetek módszerével illesztünk rá egy másodfokú polinomot:  $\ln[y(x)] = Ax^2 + Bx + C$ . Ezt összevetve az (1.12) formulával, világos, hogy az együtthatók kapcsolata az alábbi:

$$A = -\frac{1}{2\sigma^2}; \quad B = \frac{m}{\sigma^2}; \quad C = \ln N - \ln(\sqrt{2\pi\sigma}) - \frac{m^2}{2\sigma^2} \quad (1.13)$$

Ha ezeket megfordítjuk, akkor kapjuk az eloszlásgörbe adatait a polinom együtthatóival kifejezve:

$$\sigma = \sqrt{-\frac{1}{2A}}; \quad m = -\frac{B}{2A}; \quad N = \exp\left(C - \frac{B^2}{8A} + \ln\sqrt{-\frac{\pi}{A}}\right) \quad (1.14)$$

Végezetül, illusztrációképpen megmutatom az I.8.a) és b) ábrákon, hogy egy zajjal terhelt spektrumra hogyan illeszt Gauss-görbét a legkisebb négyzetek módszere.



**I.8. ábra. Gauss eloszlás illesztése zajos spektrumra. Az a) ábrán a csúcs körüli szűk tartományra, a b) ábrán a teljes adathalmazra illesztettük a görbét**

A pontok jelölik a zajos spektrumot, a folytonos görbe az illesztett Gauss-eloszlás. A zajos spektrumot egy  $m = 100,0$ ;  $\sigma = 20,0$  paraméterekkel adott Gauss görbéből készítettem úgy, hogy arra néhány %-os zajt ültettem. Az. I.8.a) ábrán a csúcs körüli szűk tartományt, a [80, 120] intervallumot választottam az illesztés alapjául. Az illesztésből számított jellemző paraméterek a következők:  $m = 100,01$ ;  $\sigma = 21,20$ . Az I.8.b) ábrán pedig az látható, hogy mi történik ha egy szélesebb tartományt, adott esetben az összes mérési pontot vesszük alapul. Ekkor az eloszlásgörbe látványosan nem jól közelíti a mérési pontokat, ráadásul ott a legjelentősebb a különbség, ahol a legpontosabbnak kellene lenni az illesztésnek. A számított adatok ebben az esetben:  $m = 99,77$ ;  $\sigma = 27,71$ . A középérték viszonylag jól adódik az utóbbi esetben is – a zaj nem torzítja el jelentős mértékben a szimmetriát –, azonban a szórás, ami a felbontóképesség mértéke, nagyon nagy, csaknem 40% relatív hibával adódik az utóbbi esetben, míg az első esetben ez a relatív eltérés mindössze 6%. Ennek oka nyilvánvalóan az, hogy a centrumtól távol eső láthatóan kiszóró pontok „elhúzzák” a görbét. Az illesztés során célszerű ezeket figyelmen kívül hagyni.

Ezzel a példával arra szerettem volna rávilágítani, hogy egyrészt nagy gondossággal kell kiválasztani azt a tartományt, amelyre görbét illesztünk, nem bízhatjuk rá kizárólag a számítógépre, mindenképpen szüksége van előtte az adatsor kvalitatív értékelésre, másrészt szerettem volna érzékelteni a hagyományos csúskeresési eljárás lehetséges hibáit.

A „hagyományos csúskeresési eljárás” fogyatékoságainak illusztrációjaként utalnék a 4. Mellékletre, ahol a Berkeley-detektor által felvett két különböző spektrumot látunk a kiértékelés után. A detektor a hagyományos módon értékeli a spektrumokat, és mint az a fotókon jól látható,

nyilvánvalóan jelen levő, karakteres Gauss-csúcsokat nem vesz figyelembe a kiértékelő algoritmus.

2. Lényegesen nagyobb hatékonysággal alkalmazható iteratív módszer a „**spectrum stripping**” eljárás [9], amelynek lényege, hogy fokozatosan, lépésről-lépésre határozzuk meg a spektrumban szereplő gamma vonalakat, tehát a sugárzó izotópokat, a csökkenő gamma energiák sorrendjében. Nevezhetnénk a „szukcesszív kivonás” módszerének is. Megközelíthetjük kísérleti, mérés technikai oldalról, de létezik a módszernek egy precízebb, modernizált, minden csatornát tekintetbe vevő numerikus változata is.

**Kísérleti oldalról** közelítve, az eljárás lényege a következő. A spektrum nagy energiájú oldalán megkeressük az első, legnagyobb energiához tartozó karakteres fotocsúcsot. A megtalált gamma vonal alapján azonosítjuk a sugárzó izotópot. Az adott izotópnak felvesszük a spektrumát ugyanazzal a detektorral, ugyanakkora erősítés esetén, majd a kapott spektrumot levonjuk a vizsgált spektrumból. A levonás előtt szükséges számítani az izotóp méréssel kapott spektrumának konstansszorosát a következő módon. Ha az összetett spektrumban az adott E energiájú gamma vonalhoz tartozó nettó csúcsterület  $N_x$ , az adott izotóp méréssel felvett spektrumában ugyanezen E energiához tartozó nettó csúcsterület pedig  $N_A$ , akkor a mért spektrumot az  $S = N_x/N_A$  aránnyal szorozzuk, tehát megnyújtjuk, hogy ugyanolyan aktivitást képviseljen, mint az összetett spektrumbeli komponens, és ezután vonjuk le az összetett spektrumból. Ezt az eljárást ismételjük addig amíg található a spektrumban hangsúlyos gamma vonal illetve amíg a beütésszámok nem csökkennek a szoftver által meghatározott **detektálási limit** alá. (Az eljárást matematikai formulákkal a következő bekezdésben mutatom be.) A módszer határozott előnye a hagyományos csúcskeresési eljáráshoz képest, hogy a „szukcesszív kivonások” során, miközben a spektrumból kivonódnak a legkarakteresebb foto-csúcsok, és a spektrum kisenergiájú végén fokozatosan eltűnnek a visszaszórás csúcsok, lépésről-lépésre láthatóvá válnak a kisebb aktivitású izotópok gamma vonalai. A vázolt módszer hangsúlyozottan a kísérlettel kapott spektrumok ismeretére épül.

Létezik azonban a „spectrum stripping” eljárásnak egy pontosabb, szintén iteratív változata, amely feltételezi a detektor válasz mátrixának ismeretét. Tegyük fel, hogy a vizsgált energiatartományt  $n$  részre osztottuk és idézzük fel, hogy az  $i$ -edik csatornában észlelt beütésszám

az  $y_i = \sum_{j=1}^n R_{ij} x_j$  összefüggésből származik, ahol  $R_{ij}$  az  $\mathbf{R}$  válasz mátrix  $i$ -edik sorának  $j$ -edik

eleme. A válasz mátrix ismeretében az eljárás nem a legnagyobb energiájú gamma-vonalnál kezdődik, hanem a **legnagyobb energiájú olyan csatornánál, amelyhez pozitív beütésszám tartozik**, de amely beütésszám ugyancsak meghaladja a detektálási limitet. Legyen ennek a csatornának az indexe  $K$ , a beütésszám ebben a csatornában  $y_K$ . Ez általában az a csatorna amely

a valós spektrumban előforduló legnagyobb energiájú energiatartományhoz tartozik, mely intervallum indexe legyen  $L$ . Ekkor az összegzés az előbbi szummában nem  $n$ -ig tart, hanem csak  $L$ -ig, és az adott esetben csak a válasz mátrix  $[R_{1L}, \dots, R_{KL}]$  elemeinek ismerete szükséges. Definiáljunk most egy  $S_L = y_K/R_{KL}$  faktort, majd a válasz mátrix idézett elemeinek  $S_L$  szeresét rendre levonjuk a méréssel kapott  $y$  spektrum megfelelő komponenseiből:

$$\begin{aligned} y'_K &= y_K - S_L R_{KL} = 0 \quad (\text{def.szerint}); \\ y'_{K-1} &= y_{K-1} - S_L R_{(K-1)L}; \\ &\dots \\ y'_1 &= y_1 - S_L R_{1L} \end{aligned} \tag{1.15}$$

Ebben az esetben az  $y'$  spektrum tekintendő a  $K$ -adik csatorna járuléka nélküli spektrumnak. Az iterációt a következő lépésben az  $y'$  spektrumra, mint „bemenő” spektrumra alkalmazzuk, és ezt az eljárást folytatjuk addig amíg eljutunk az 1. csatornáig. Ha a válasz mátrix oszlopai normált eloszlások, akkor pontosan az  $S_i$  ( $i = 1, 2, \dots, L$ ),  $S_i = 0$  ( $i = L+1, \dots, m$ ) faktorokból képezett  $S$  vektor tekintendő a tényleges spektrum intenzitáseloszlásának. A módszer tehát iteratív módon, legfeljebb  $m$  lépésben szolgáltatja a valós spektrumot. De ismét hangsúlyozzuk, hogy a módszer feltételezi a válasz mátrix ismeretét. Ennek előállítására az V. fejezetben adok részletesen kidolgozott eljárást.

Az értekezésemben tárgyalt dekonvolúciós módszerek – melyek szintén az  $R$  válasz mátrix ismeretére támaszkodnak – tekinthetők a „spectrum stripping” eljárás továbbfejlesztésének. Ugyanis a dekonvolúció során, amikor is az  $y = Rx$  egyenletrendszert oldjuk meg, a tényleges spektrum komponensei, az előbbi szóhasználattal az intenzitáseloszlás minden komponense, bár ugyancsak iteratív algoritmusok eredményeképpen, de egyetlen lépésben adódik.

3. További klasszikusnak tekinthető eljárás a **spektrum második deriváltjának** számítása. A módszer azt aknázza ki, hogy a csúcsok helyén a második deriválnak éles minimuma van. Az eljárást a IV. fejezetben a Fourier-transzformáció alkalmazásai között részletesen elemzem és összehasonlítom más dekonvolúciós technikákkal. Annyit már most kiemelek, hogy az eljárás nem alkalmazható eredményesen akkor, ha segítségével több izotóp együttesének spektrumát vizsgáljuk közel eső, átfedő gamma vonalak esetén. A módszer felbontása kifejezetten rossz, és nem szolgáltat minden gamma vonalat.

### **I.3. AZ ALKALMAZOTT SZOFTVER, A „MATLAB”, ÉS AZ INFORMATIKAI KÖRNYEZET VÁZLATOS BEMUTATÁSA**

Mivel az értekezésem lényegében numerikus módszerek kidolgozásáról és ezeknek az algoritmusoknak egy adott programnyelven történő implementációját követő futtatásáról szól,

szükségesnek érzem pár sorban jellemezni mind az informatikai környezetet, mind pedig az alkalmazott szoftvert. Az előbbi jelentősen befolyásolja például a számítások elvégzéséhez szükséges időtartamot, az utóbbi pedig érinti az alkalmazott/alkalmazható programnyelvet és felvet kompatibilitási kérdéseket.

A számításokat egy hordozható számítógépen végeztem, amelyben egy kétmagos CPU, egy 2,00 GHz órajelű Intel Core-2 Duo processzor van, 1 MB Cache-memóriával, 1,20 MHz frekvencián működő 3GB operatív memóriával. Ezek az adatok befolyásolják a számítások sebességét – a számításokhoz szüksége háttértár méretét is figyelembe véve –, ami az algoritmusok kidolgozásánál egy lényeges kérdés. Nyilvánvaló, hogy az általam közölt adatok egy másik számítógépen más értéknek adódnak. Továbbá fontosnak tartom kiemelni, hogy az alkalmazott szoftver 32 bites WINDOWS-XP operációs rendszer alatt futott, ugyanis kiderült, hogy a MATLAB például WINDOWS-VISTA környezetben nem működik, el sem indul, csak egy hibüzenetet kapunk.

Az alkalmazott szoftver a MATLAB 6.5. verziója [37]. Azért választottam éppen ezt, mert egyrészt a MATLAB egy nagy hatékonyságú, tudományos és műszaki számítások, valamint a számítási eredmények vizuális megjelenítésének támogatására kifejlesztett rendszer. (Az értekezésben, a függelékben és a MELLÉKLET-ben szereplő összes ábrát – kivéve az 1-4. fényképeket, amelyeket szintén én fotóztam –, mind a MATLAB-bal készítettem, sem ábrát sem grafikont nem vettem át más forrásból.) Másrészt pedig, tekintettel arra, hogy a MATLAB név a MATrix LABoratory elnevezésből származik, már a neve is mutatja, hogy a rendszer alapvetően lineáris algebrai problémák megoldását támogatja. Amint pedig az I.1. pontból kiderült, az általam vizsgált spektrumkiértékelési probléma éppen egy különleges lineáris rendszer megoldását jelenti, így a MATLAB ideális programozási környezetet jelent a számítások elvégzéséhez. A MATLAB speciális problémakörök vizsgálatához támogat ún. „toolbox”-okat, azaz eszköztárakat, amelyekben összetett eljárásokat egyetlen parancsszóval lehet futtatni, nincs szükség semmiféle programozásra. Én ezeket tudatosan elkerültem, sőt még az alapkiépítésben található beépített programokat sem használtam minden esetben, hanem inkább kódoltam a szükséges eljárásokat. Példaként említeném a görbeillesztés vagy a diszkrét Fourier-transzformáció algoritmusát, vagy említhetném a Gram-Schmidt ortogonalizációt, amelyek beépült függvények a MATLAB-ban, de egyes esetekben célszerűnek láttam ezek alkalmazását kerülni. Viszont tudatosan alkalmaztam például a Gauss-elimináció vagy a mátrix invertálás algoritmusát, hiszen ezek annyira közismertek, hogy minden témakörrel foglalkozó szakirodalomban szerepelnek és más matematikai szoftverekben is megtalálhatóak. Ugyanis az a cél vezérelt, hogy az értekezésben közölt eredményeket olyan felhasználók is alkalmazhassák, akik nem rendelkeznek MATLAB-bal. Számukra segítséget jelentenek a programok



implementációi, az ún. M-file-ok, melyek tanulmányozásával, azok mintájára, egy másik programnyelven is kódolhatják az algoritmusokat. A MATLAB forrásnyelve a C-nyelv, a kézikönyv szerint [37] a C-nyelven írt kódokat a szoftver megérti, bár nyilvánvalóan egyszerűbb MATLAB-ban megírni egy programot mint C-ben.

Értekezésem jelentős részét képviseli az algoritmusok MATLAB-implementációja, hiszen egyrészt ezek az algoritmusok konkrét implementáció nélkül nem használhatók, másrészt a programcsomag bizonyítja, hogy az algoritmusok használhatók a gyakorlatban. Ezek mind önállóan futtatható programok, a MATLAB nyelvén ún. M-file-ok, egyik sem függ közvetlenül a többitől. Ezek az M-file-ok egy komplett szoftverrendszert alkotnak, amelyekkel egyrészt elvégezhető a szcintillációs detektor összes szükséges kalibrációja, előállítható a detektor válasz mátrixa és elvégezhető a spektrumok kiértékelése két aspektusból: egyrészt a dekonvolúciós algoritmusokkal azonosítani lehet a sugárzó izotópokat, másrészt több izotóp együttes sugárzása esetén a szelektív aktivitás-meghatározás is elvégezhető. Minden egyes M-file-t bőségesen elláttam megjegyzésekkel, kommentárokkal, hogy az alkalmazó számára világosak legyenek egyrészt a bemenő paraméterek és az is hogy a program melyik lépésben milyen műveletet hajt végre. Tettem mindezt annak érdekében, hogy ha egy felhasználó nem rendelkezik MATLAB-bal, akkor könnyen lefordíthassa a programokat egy másik nyelvre.

## ÖSSZEGZÉS

Mielőtt belefognék a II. fejezet dekonvolúciós módszereinek vizsgálatába kihangsúlyozom, hogy a problémát a soron következő fejezetben tisztán matematikai problémaként fogom vizsgálni. Rosszul kondicionált lineáris rednszerek megoldására fogok közölni hatékony eljárásokat. Az első pontban vázlatosan bemutattam a problémát matematikai oldalról, de természetesen, a témakörben járatlan olvasó számára elengedhetetlen az adekvát szakirodalom áttanulmányozása.

A matematikai megközelítés csak annyiban hasonlít a valós gamma spektrumokra, hogy ezekben a gamma vonal egy Gauss görbével leírható foto-csúcs. Egy valós spektrum természetesen tartalmaz még egyéb részleteket, Compton tartományt és viszaszórási csúcsot feltétlenül, de mint látni fogjuk, a tisztán Gauss függvények összegének dekonvolúciójára alapuló vizsgálat is tanulságos. Megmutatja, hogy melyek azok az algoritmusok, amelyek már ebben az esetben sem alkalmazhatók kellő hatékonysággal, melyek azok amelyek nem bontják fel a spektrumot Dirac deltákkal egyenértékű „gamma vonalakra”. Lehetőséget teremt továbbá az összehasonlításra, a konvergencia sebességének és a felbontóképességnek a vizsgálatára. Természetesen alkalmazom majd a kidolgozott algoritmusokat valós, méréssel kapott gamma

spektrumok dekonvolúciójára az V. pontban. Ott bizonyítást nyer, hogy egy alkalmas válasz mátrix birtokában – melynek előállítására szintén az V. pontban írok le egy eljárást –, a tisztán matematikai környezetben vizsgált algoritmusok megtartják előnyös tulajdonságaikat és valóban gyorsabbak és nagyobb felbontásúak, mint a szakirodalomban fellelhető eljárások.

Az I. pontban vázlatosan leírtam „klasszikus”-nak nevezhető eljárásokat Ezeket nem fogom alkalmazni, csak abból a szempontból vizsgáltam/vizsgálom ezeket, hogy megmutassam, a dekonvolúciós technikák mennyivel hatékonyabbak. Kiemelem, hogy a klasszikus módszerek elsősorban a matematikai analízis hagyományos módszereit alkamazzák, míg a dekonvolúciós technikák a számítógépek adta lehetőségeket aknázzák ki, azt a képességet, hogy nagy mennyiségű numerikus lineáris algebrai számítást tudnak elvégezni rövid idő alatt.

## II. FEJEZET: DEKONVOLÚCIÓS MÓDSZEREK

### II.1. KLASSZIKUS LINEÁRIS ALGEBRAI ITERÁCIÓS ALGORITMUSOK ÉS EZEK JAVÍTOTT VÁLTOZATAI

Legyen  $\mathbf{R} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$  a detektor válasz mátrixa,  $\mathbf{y} \in \mathfrak{R}^n$  a mért spektrum. Az I. fejezetnek megfelelően alkalmazzuk az  $\mathbf{A} = \mathbf{R}^* \mathbf{R}$ , és az  $\mathbf{y}' = \mathbf{R}^* \mathbf{y}$  jelölést és ez utóbbiban a ' jelet elhagyjuk. Tehát az  $\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  egyenletrendszer helyett az  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  egyenletrendszert oldjuk meg, ebben a pontban iterációval. Számos iterációs algoritmus létezik. Mielőtt részletesen bemutatnánk néhányat, amely a felvetett probléma megoldására alkalmas, először az iteráció megvalósításának alap gondolatát mutatjuk be [10,16,18].

Mindenekelőtt alkalmazzunk egy szokásos elnevezést. Megengedett megoldásnak nevezzük az  $\mathbf{x}^{(k)}$  megoldást, ha az eleget tesz minden olyan matematikai (illetve fizikai) feltételnek amelyet a megoldástól eleve elvárunk. A mi esetünkben ez azt jelenti, hogy kizárólag nem negatív komponensekből álló vektorok között keressük a megoldást, mivel ennek van fizikailag értelme. Így a megengedett megoldások halmaza:

$$\Omega = \{ \mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n \mid x(j) \geq 0; j = 1, 2, \dots, n \}$$

Oldjuk meg az  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  egyenletrendszert  $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}$  alakú iterációval. Az iterációs formula az alábbi gondolatmenettel adódik: Legyen  $\mathbf{A} = \mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2$  az  $\mathbf{A}$  olyan felbontása, melyben  $\mathbf{A}_1$  reguláris. Ekkor  $\mathbf{A}_1\mathbf{x} + \mathbf{A}_2\mathbf{x} = \mathbf{y}$  átrendezésével  $\mathbf{A}_1\mathbf{x} = -\mathbf{A}_2\mathbf{x} + \mathbf{y}$  adódik. Ha ezt megszorozzuk balról  $\mathbf{A}_1$  inverzével – ez létezik, hiszen éppen ezért választottuk  $\mathbf{A}_1$ -et regulárisnak –, akkor az  $\mathbf{x} = -\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{x} + \mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{y}$  egyenletet kapjuk. Vezessük be a  $\mathbf{B} = -\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2$  és az  $\mathbf{f} = \mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{y}$  egyszerűsítő jelöléseket. Így éppen az iterációra alkalmas  $\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{f}$  alakot kapjuk. Közelebbről  $\mathbf{B} = \mathbf{A}_1^{-1}(-\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}) = -\mathbf{E} + \mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}$ , ahol  $\mathbf{E} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$  az identitásmátrix. Az  $\mathbf{A}_1$  mátrixot úgy célszerű megválasztani, hogy  $\mathbf{B}$  normája kicsi legyen, mert ekkor a konvergencia gyors. Magától értetődik, hogy egy iterációs formula csak akkor alkalmazható értelmes módon, ha bizonyítva van a konvergencia. Alapvető tétel, hogy a fenti iterációs formula esetén a konvergencia szükséges és elégséges feltétele az, hogy  $\mathbf{B}$  spektrálsugarára – tehát az abszolút értékben maximális sajátértékére –,  $\rho(\mathbf{B}) = \max |\lambda(\mathbf{B})| < 1$  teljesüljön. Az alábbiakban közölt algoritmusok esetében ennek a feltételnek feltétlenül teljesülnie kell.

A következő pontokban több olyan algoritmust ismertetek, amelyek tartalmaznak bizonyos szabad paramétereket. Így többször is szerepel majd annak vizsgálata, hogy ezek a szabad paraméterek milyen hatással vannak az iteráció eredményére. Sajnos terjedelmi korlátok miatt nem szerepeltethetem a következő oldalakon minden próbálkozásom eredményét. Csak a

tapasztalatok szerinti legjobb megoldást, a paraméterek értékének „optimális” változatát, illetve az ezekkel kapcsolatos számítások eredményét áll módomban beilleszteni a dolgozatba.

További kérdés az iteráció megállási kritériumának meghatározása. Erre is több lehetőség létezik:

1. Legnyilvánvalóbb a következő: előírjuk, hogy  $L$  lépésből álljon az iteráció. Ennek hátránya, hogy nem kapunk közvetlenül információt a konvergencia sebességéről.
2. Vizsgálható a szomszédos megoldások eltérésének normája. Előírunk egy kicsiny pozitív  $\varepsilon$  hibakorlátot, és az iteráció leáll az  $L$ -edik lépésben ha  $\|\mathbf{x}^{(L+1)} - \mathbf{x}^{(L)}\| < \varepsilon$ .
3. Ha az  $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$  rendszert oldjuk meg ahol  $\mathbf{y}$  ismert, akkor az előzőhöz hasonlóan megállási kritérium lehet a  $\|\mathbf{Ax}^{(L)} - \mathbf{y}\| < \varepsilon$  feltétel teljesülése adott  $\varepsilon$  hibakorlát esetén.
4. Alkalmazható a  $\chi^2$  statisztika is a megoldás „jóságának” eldöntésére. A  $k$ -edik lépésben kapott megoldás esetére kiszámítjuk a  $\chi^2 = \sum_{i=1}^m \frac{((\mathbf{Ax}^{(k)})_i - y_i)^2}{\sigma_i^2}$  mennyiséget, ahol  $\sigma_i$  a megoldás  $i$ -edik komponensének szórása. Ha  $\mathbf{y} \in \mathfrak{R}^n$  akkor köztudottan  $M(\chi^2) = n$ . Ha  $|\chi^2 - n| < k$ , ahol  $k$  előre adott pozitív valós szám, az iteráció leáll.

A kidolgozott algoritmusok mindegyikénél szükséges egy megállási kritérium alkalmazása. Gyakorlatilag a fentiek közül bármelyik alkalmazható, ez a felhasználó döntésén múlik. Azonban terjedelmi korlátok miatt minden algoritmus esetében csak egyet alkalmazok majd, de mindegyik módszert illusztrálom a megfelelő helyen.

### II.1.1. GAUSS-SEIDEL ITERÁCIÓ

A klasszikus Gauss-Seidel iteráció esetében az  $\mathbf{A}$  mátrix felbontása a következőképpen történik [13,17]: jelölje  $\mathbf{D}$  azt a diagonális mátrixot, amelynek főátlója megegyezik az  $\mathbf{A}$  mátrix főátlójával.  $\mathbf{L}$  jelölje azt az alsó háromszögmátrixot, melynek elemei rendre megegyeznek az  $\mathbf{A}$  főátló alatti komponenseivel, és  $\mathbf{U}$  pedig az ugyanilyen módon megszerkesztett felső háromszögmátrixot. Nyilvánvalóan teljesül ekkor az  $\mathbf{A} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}$  egyenlőség. Az  $\mathbf{A}$  felbontása pedig  $\mathbf{A}_1 = \mathbf{L} + \mathbf{D}$ ,  $\mathbf{A}_2 = \mathbf{U}$ . Ekkor – a mondott feltételek miatt –  $\mathbf{A}_1$  nyilvánvalóan reguláris, hiszen  $\det(\mathbf{A}_1)$  éppen a  $\mathbf{D}$  elemeinek szorzata, és mivel ezek között a feltevések miatt nincs zérus, a szorzat sem zérus, ez pedig pontosan egyenértékű  $\mathbf{A}_1$  regularitásával. Ezekkel a jelölésekkel az  $\mathbf{x} = -\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{x} + \mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{y}$  iterációs formula az

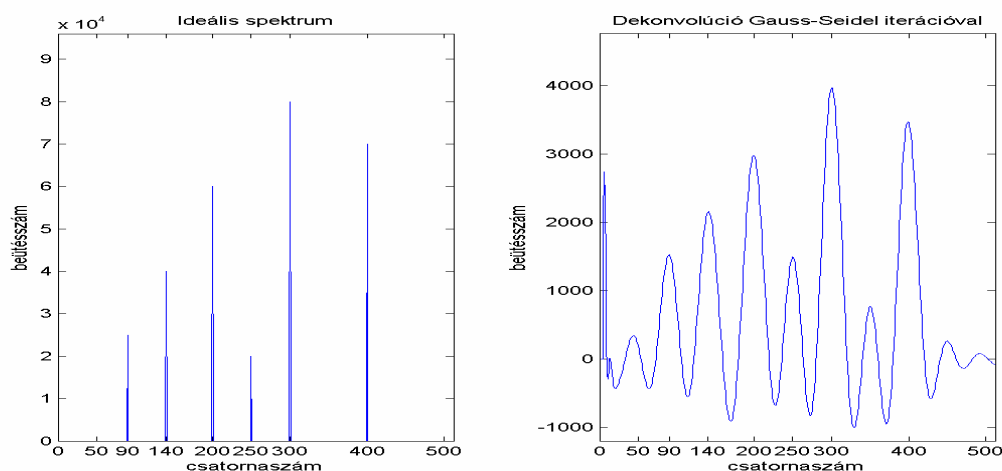
$$\mathbf{x}^{(k+1)} = -(\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1}\mathbf{U}\mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1}\mathbf{y} \quad (2.1)$$

alakot ölti. A konvergencia elégséges feltétele – tetszőleges  $\mathbf{x}^{(0)}$  induló megoldás esetén – az, hogy  $\text{norm}[(\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1}\mathbf{U}] < 1$  teljesüljön.

Az előbbieken két feltétel is szerepel, amely a konvergenciát biztosítaná, de sajnálatos módon a detektorok válasz mátrixára csak az egyik teljesül, mégpedig az, hogy a főátlóban nullától különböző elemek állnak, de a normára vonatkozó feltétel nem teljesül.

Használjuk ki azonban a probléma specialitását, mégpedig azt, hogy az  $\mathbf{A}$  együtttható mátrixot  $\mathbf{A} = \mathbf{R}^*\mathbf{R}$  alakban állítottuk elő. Ebből ugyanis következik, hogy az  $\mathbf{A}$  mátrix szimmetrikus és pozitív szemidefinit. A Gauss-Seidel iteráció abban az esetben konvergens, amikor az  $\mathbf{A}$  mátrix szimmetrikus és pozitív definit. Sajnálatos módon azonban detektorok válasz mátrix esetében nem garantálható a pozitív definité, a tapasztalatok azt mutatják, hogy az  $\mathbf{A}$  együttthatómátrixnak számos, közel száz zérus sajátértéke is lehet.

Az alábbiakban illusztrálom, hogy az iteráció alapesetben nem ad használható megoldást. Ehhez felhasználjuk az I. fejezetben ismertett ideális Gauss-spektrumot, ideális válaszfüggvénnyel. Mielőtt a megoldást szemléltetnénk, megemlítjük, hogy  $\mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{512 \times 512}$  együttthatómátrix esetén,  $\text{norm}[(\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1}\mathbf{U}] = 6,86$  – ez az Euklideszi norma, ami gyakorlatilag a spektrálsugár – tehát az elégséges feltétel nem teljesül, és 23 db zérus sajátértéke van, tehát a mátrix nem pozitív definit.



**II.1. ábra. Ideális spektrum dekonvolúciója Gauss-Seidel iterációval**

Jól látható a II.1. ábrán, hogy a megoldás nem „pozitív szemidefinit”, vannak negatív komponensek, aminek nincs fizikai jelentése, továbbá oszcilláló megoldást kaptunk, amit ugyancsak nem vártunk, és ha felfedezni vélünk – a bal oldali ábrán leolvasható pozícióknál – Gauss-görbére hasonló csúcsokat, világosan látszik, hogy megjelennek hamis csúcsok is, tehát a megoldás mindenképpen megbízhatatlan. Tehát az iteráció ebben a hagyományos formában nem használható. Megjegyezzük, hogy az ábrázolt megoldás egy  $L = 1000$  lépéses iteráció eredménye, melyhez szükséges számítási idő LU-felbontással 5,31s. Az előbbieken vázolt időbeli különbséget kiemelve, ha ugyanezt az algoritmust nem LU-felbontással, hanem az inverz

tényleges kiszámításával végezzük el, 225,3s időre van szükség, ami valóban jelentős időkülönbség. A megoldás természetesen ugyanaz.

## II.1.2. A GAUSS-SEIDEL ITERÁCIÓ REGULARIZÁCIÓJA

Világos, hogy a probléma abban rejlik, hogy az együtthatómátrix nem pozitív definit. Módosítsuk tehát ennek érdekében a problémát úgy, hogy az együtthatómátrixot pozitív definitté változtatjuk. Ez a lépés tulajdonképpen a regularizáció problémakörét érinti [30-36]. A klasszikus módszerek vizsgálata során kiderül, hogy a megoldás során a legtöbb problémát a kicsi, nulla illetve nullához közeli sajátértékek okozzák. A regularizáció során az  $\mathbf{A}$  szimmetrikus, pozitív szemidefinit mátrixot úgy közelítjük mátrixok seregével, hogy a közelítő mátrixok sajátértékei távol maradjanak a zérustól. Legyen  $\mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ , és  $\alpha > 0$ , valós szám. Definiáljuk közelítő mátrixok  $\mathbf{A}_\alpha$  seregét az alábbi módon:

$$\mathbf{A}_\alpha = \mathbf{A} + \alpha \cdot \mathbf{E} \quad (2.2)$$

ahol  $\mathbf{E} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$  az identitásmátrix. Tehát nem teszünk mást, mint az  $\mathbf{A}$  mátrix főátlójának minden eleméhez hozzáadunk  $\alpha$ -t. Ha  $\alpha \rightarrow 0$ , akkor nyilván teljesül, hogy  $\mathbf{A}_\alpha \rightarrow \mathbf{A}$ . Ha az  $\mathbf{A}$  mátrix sajátértékei a  $\lambda_i$  valós számok, akkor  $\mathbf{A}_\alpha$  sajátértékei a  $\lambda_i + \alpha$  valós értékek, ugyanis:

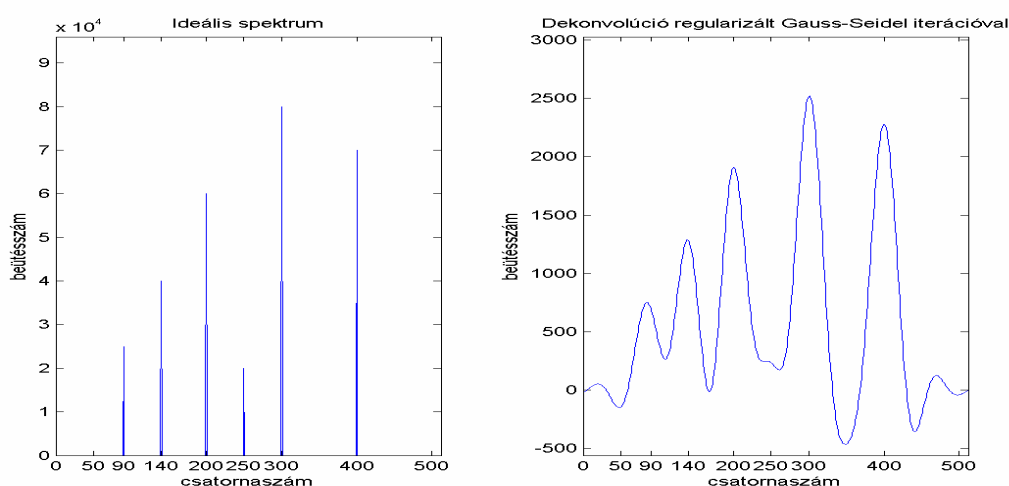
$$\mathbf{A}_\alpha \mathbf{u}_i = (\mathbf{A} + \alpha \cdot \mathbf{E}) \mathbf{u}_i = \mathbf{A} \mathbf{u}_i + \alpha \cdot \mathbf{E} \mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{u}_i + \alpha \mathbf{u}_i = (\lambda_i + \alpha) \mathbf{u}_i \quad (2.3)$$

Az  $\alpha$  valós számot **regularizációs paraméternek** nevezzük. Mivel  $\mathbf{A}$  sajátértékei mind nem negatívak, világos, hogy tetszőleges kicsi  $\alpha > 0$  paraméter esetén  $\mathbf{A}_\alpha$  sajátértékei szigorúan pozitívak lesznek, tehát az  $\mathbf{A}_\alpha$  mátrix pozitív definit. Az eredeti  $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{y}$  egyenletrendszer helyett megoldjuk az  $\mathbf{A}_\alpha \mathbf{x} = \mathbf{y}$  egyenletrendszert kicsiny  $\alpha > 0$  paraméter mellett úgy, hogy  $\alpha \rightarrow 0$ . Ez utóbbi határátmenet azonban csak elméleti megfontolásoknál használható egzaktul. Numerikus számításoknál figyelembe kell venni a számítógép számításainak pontosságát, ha  $\alpha$  értékét egy bizonyos határon túl csökkentjük, azt a szoftver 0-nak tekinti, így van egy ésszerű határ – ami gépfüggő –, aminél tovább nincs értelme csökkenteni  $\alpha$  értékét. Ez gyakorlatilag annyit jelent, hogy a MATLAB számára – a számítógép számítási pontosságának figyelembe vételével – az  $\mathbf{A}_\alpha$  mátrix reguláris kell, hogy legyen, ha ez nem teljesül, akkor a regularizáció nem működik. Természetesen felmerül a kérdés, hogy a helyettesítő probléma megoldása milyen módon közelíti az eredeti probléma megoldását. Ezt a tapasztalat útján fogjuk megvizsgálni. Itt konkrétan arról van szó, hogy a mátrixot helyettesítettük egy másik mátrixszal, megváltoztattuk  $\mathbf{A}$ -t  $\delta \mathbf{A}$ -val. Kérdés, milyen kihatással van ez a megoldásra. Az (1.7) formula válaszol erre a kérdésre. Cél, hogy  $\|\delta \mathbf{x}\|/\|\mathbf{x}\|$  hányados minimális legyen. A kondíciószám nyilvánvalóan rögzített. Ilyen esetben ennek a hányadosnak nem létezik minimuma, hiszen ha kondíciószám és

az  $\mathbf{A}$  mátrix normájának hányadosát az egyszerűség kedvéért  $C$  jelöli, és  $t$  jelöli a  $\delta\mathbf{A}$  normáját, mint változót, akkor feladatunk az alábbi  $f(t)$  függvény szélsőértékének meghatározása:

$$f(t) = \frac{C \cdot t}{1 - C \cdot t}; \quad \frac{d}{dt} \left( \frac{C \cdot t}{1 - C \cdot t} \right) = \frac{C(1 - C \cdot t) - C \cdot t(-C)}{(1 - C \cdot t)^2} = \frac{C}{(1 - C \cdot t)^2} \quad (2.4 - 2.5)$$

A derivált  $C > 0$  miatt szigorúan pozitív, azaz a függvény szigorúan monoton növekedő, ami a probléma ismeretében intuitíve is nyilvánvaló. Ennek alapján kijelenthetjük, hogy a hiba akkor a legkisebb, ha  $\delta\mathbf{A}$  normája a lehető legkisebb de legfeljebb annyira kicsi, hogy a gép számára az  $\mathbf{A}_\alpha$  mátrix még reguláris marad.  $\alpha$ -t addig csökkentjük, amíg  $\mathbf{A}_\alpha$  reguláris marad, ennél tovább nincs értelme a csökkentésnek. Azonban nincs értelme elvileg sem minden határon túl csökkenteni a paraméter értékét, hiszen azt szeretnénk, hogy lényeges tulajdonságaiban megváltozzon a megoldás. Eszerint egy kompromisszumos érték lehet a jó választás, „se nem túl kicsi, se nem túl nagy”, ezt minden algoritmus esetén meg kell határozni. Általában az algoritmusok érzékenyek erre a paraméterre, a II.4. pontban mutatok be egy olyan algoritmust, amely a regularizációs paraméter választására sokkal tágabb intervallumban érzéketlen, azaz a megoldás stabil marad.



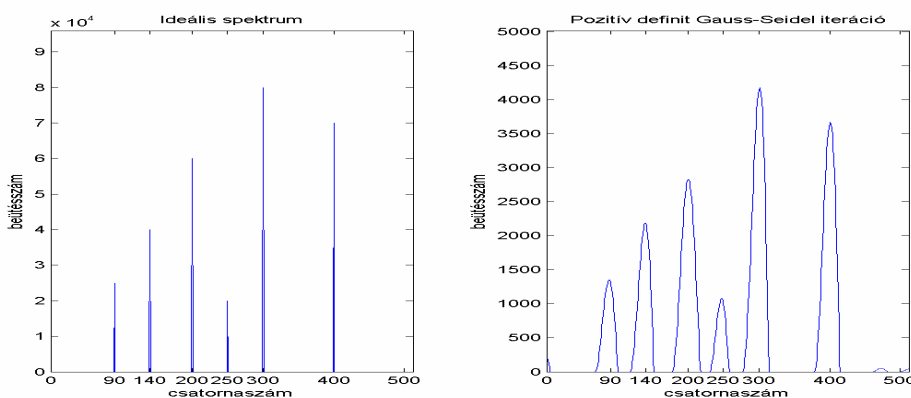
**II.2. ábra. Megoldás regularizált Gauss-Seidel iterációval**

Lássuk tehát, milyen hatással van a Gauss-Seidel iterációra a vázolt regularizáció. Oldjuk meg ugyanazt az egyenletrendszert mint, az előbb ideális forrás és ideális válasz mátrix esetében. Az  $\mathbf{A}$  mátrix rangja  $r(\mathbf{A}) = 489$ , tehát a regularizálatlan mátrix szinguláris. Ha a regularizációs paraméternek az  $\alpha = 10^{-4}$  értéket adjuk, akkor  $r(\mathbf{A}_\alpha) = 512$ , „ $\mathbf{A}$  tehát regulárisává vált”,  $\mathbf{A}_\alpha$  már pozitív definit, de a két megoldás között gyakorlatilag nem látható különbség. Meg kell növelnünk  $\alpha$  értékét annak érdekében, hogy megváltozzék a megoldás. Legyen  $\alpha = 10^{-2}$ . Ekkor a regularitás és a pozitív definittség továbbra is fennáll. Az ugyancsak 1000 lépéses iteráció eredménye a II.2. ábrán látható.

Jelentős különbség látható a regularizálatlan és a regularizált megoldás között. A megoldás sokkal kevésbé oszcillál, már „majdnem pozitív szemidefinit”, azaz sokkal kevesebb negatív komponens adódik megoldásképpen, a hamis csúcsok intenzitása kisebb, de mindenképpen hátrány, hogy a 250. csatornához tartozó csúcs nem jelenik meg karakteresen, a két szomszédos csúcs ezt eltakarja. Egyébként a számítási idő 5,34s tehát gyakorlatilag nem változott az előzőhöz képest, továbbá van egy jelentős különbség a két megoldás között, amire eddig nem utaltam, most viszont fontos szerepet kap.

A megállási kritérium legyen az  $\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| < \varepsilon$  egyenlőtlenség. Ha ez teljesül adott  $\varepsilon$  esetén egy bizonyos  $k$ -ra, akkor az  $\mathbf{x}^{(k)}$  vektort fogadjuk el megoldásnak. Mármost az előzőekben vizsgált 1000 lépéses iterációnál ez a norma rendre 34,3 illetve 0,0139, ami azt jelenti, hogy a regularizált megoldás sokkal gyorsabban konvergál.

Még egy módosítást végrehajtok az iterációs algoritmusban annak érdekében, hogy elkerüljük a negatív megoldásokat a következő egyszerű módon. A  $k$ -edik lépésben kapott megoldás minden negatív komponensét nullává változtatom, azaz képezem az  $\mathbf{x}^{(k)}$  megoldás ortogonális projekcióját a megengedett megoldások  $\Omega$  halmazára, ezt a projekciót jelöli  $\mathbf{x}_p^{(k)}$ , és a  $(k + 1)$ -edik lépésben ebből a  $\mathbf{x}_p^{(k)}$  vetület-vektorból számítjuk az  $\mathbf{x}^{(k+1)}$  közelítést, a jelzett módosítást ezen is elvégzem, majd ezt ismétlem minden iterációs lépésben. Mivel pozitív definit mátrix esetén az iteráció tetszőleges kezdőérték esetén konvergens, ezekkel a módosításokkal is konvergens iterációt kapunk, a változtatás csak annyi, hogy minden lépésben egy valós megoldáshoz közelebbi induló vektort választunk.



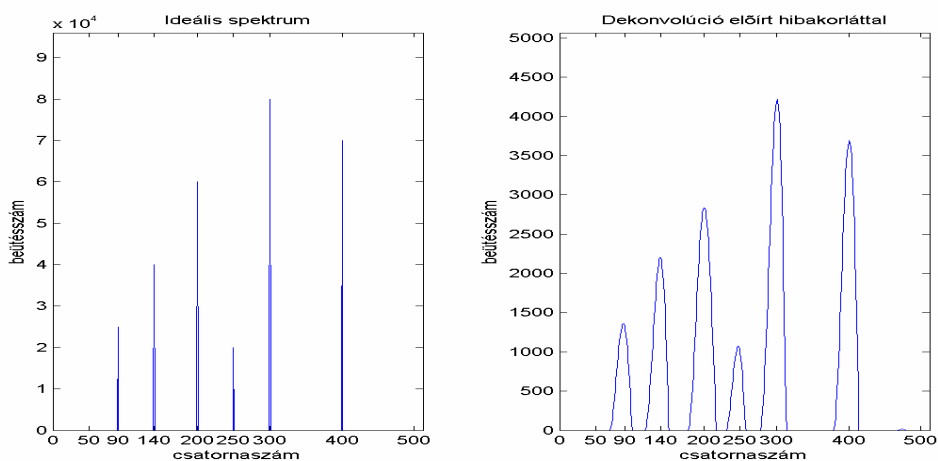
**II.3. ábra. Regularizált, „pozitív definit” Gauss-Seidel iteráció eredménye**

Lássuk, hogyan módosítja ez az átalakítás az előzőekben kapott megoldást. Oldjuk meg most már harmadszor ugyanazt a rendszert 1000 lépés alkalmazásával, regularizáció és a negatív koordináták elhagyása esetén. A II.3. ábrán látható az eredmény. Ami a megoldásról leolvasható: nyilvánvalóan nem negatív, nem oszcilláló, eltűntek a hamis csúcsok, szemre ott vannak a megoldás csúcsai mint a baloldali egzakt értékek – erre még az alábbiakban visszatérünk –, és



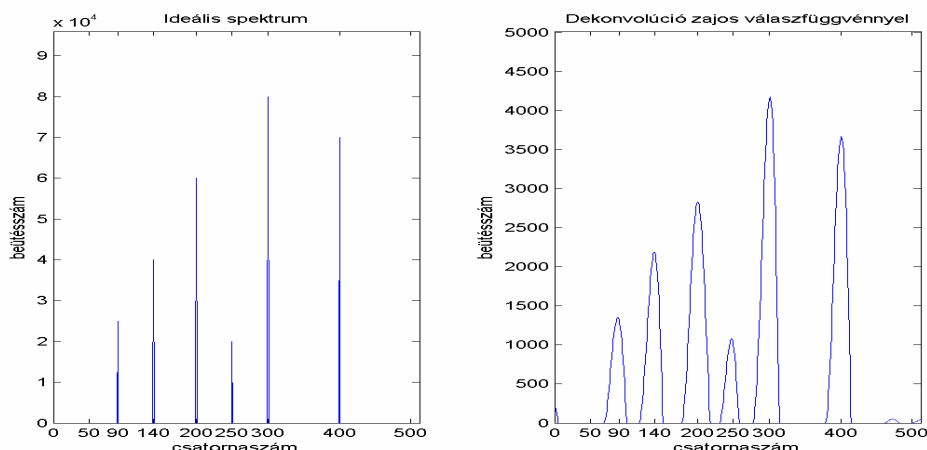
még ki kell hangsúlyozni, hogy a számítási idő ismét 5,43s tehát ez nem változott, a szomszédos megoldások normája 1000 lépés után pedig 1,17. Ez ugyan gyengébb mint az előbbi, de még mindig egy nagyságrenddel jobb, mint a regularizálatlan esetben. A regularizációs paraméter értéke ebben az esetben  $\alpha = 10^{-3}$  volt. Különbözik a korábbiaktól. Ez nem véletlen, ezek a számításoknak éppen az a célja, hogy beállítsuk  $\alpha$  értékét úgy, hogy a módszer használható legyen, azaz validáljuk az algoritmusainkat. Ebben az esetben ez a legmegfelelőbb érték.

Mielőtt rátérnék zajos spektrumok dekonvolúciójára, futtassuk az iterációt egy másik, a gyakorlat számára hasznosabb megállási kritériummal. Legyen  $\varepsilon = 10^{-3}$  a hibakorlát. Az adott esetben, amikor a megoldás 512 komponensből áll, ekkora eltérés a normákban, már elég csekély ahhoz, hogy az iterációval kapott értéket elfogadjuk megoldásnak. Legyen tehát  $\varepsilon = 10^{-3}$  és  $\alpha = 10^{-3}$ . Az eredmény a II.4. ábrán látható. Az iterációhoz 2193 lépésre volt szükség, a számítás időtartama 20,67s és az eltérés normája  $9,97 \cdot 10^{-4}$ . Mivel nem az eredeti egyenletrendszert oldottuk meg, hanem egy módosított rendszert, természetesen nem várhatjuk el, hogy a megoldás egzakt Dirac-féle delta függvényekből álljon. Számunkra a csatornaszám a fontos, mert – energia kalibrációt követően – ebből tudunk következtetni az izotóp minőségére. Ennek érdekében a megoldásban kapott csúcsokra egyenként illesztünk egy-egy Gauss-görbét, és tényleges megoldásként ezek középértékét fogadjuk el. Ezt a programot megvalósítom, de először megvizsgálom, hogy a módszer zajos spektrumok esetében is jól működik-e?



**II.4. ábra. Regularizált Gauss-Seidel iteráció megállási kritériummal**

Az eddigiekben feltettük, hogy a detektor válasz mátrixra minden Dirac-impulzusra egy egzakt, sima Gauss görbe. Ez a gyakorlatban nem teljesül, ezért alkalmazom most a fenti iterációt az I. pontban definiált zajos spektrumra. A II.5. ábra szemlélteti az eredményt az előző paraméterek alkalmazása esetén.



**II.5. ábra. Regularizált, „pozitív szemidefinit” Gauss-Seidel iteráció zajos válasz mátrix esetén**

„Észrevehetően” nincs lényeges különbség a II.4. és II.5. ábrákon látható megoldás között. Az iterációhoz 2231 lépésre volt szükség, a számítás időtartama 21,68s és az eltérés normája  $9,97 \cdot 10^{-4}$ . Az előbbieken tapasztalt „jó tulajdonságok” nem vesznek el attól, hogy zajos spektrumot vizsgáltunk, tehát megállapíthatjuk, hogy a Gauss-Seidel iteráció a jelzett módosításokkal alkalmas rosszul kondicionált feladatok megoldására.

Visszatérve az előbbieken felvetett kérdésre, számítsuk ki a megoldásgörbén a csúcsok helyzetét. Ehhez minden egyes csúcsot az átlagérték környezetében egy Gauss-görbével közelíték, és kiszámítom az illesztés során kapott paramétereiből a várható értéket. A II.1. táblázat tartalmazza az egzakt és a számított értékeket. Ebből látható, hogy a két érték relatív eltérése minden egyes csúcra, tehát a vizsgált teljes energiatartományra kevesebb, mint 2%, és egy kivétellel 1%-nál is kisebb. Az abszolút eltéréseket figyelembe véve, tekintette arra, hogy egy csatorna 2-4 keV szélességű energiatartományt jelent, azt mondhatjuk, hogy azokban az esetekben, amikor a foto-csúcs el van takarva részben vagy egészben, 2-3 csatornát tévedhetünk, ami 4-12 keV energiabizonytalanságot eredményez. A jól látható, karakteresen megjelenő csúcsoknál ez a tévedés legfeljebb 1 csatorna azaz 2-4 keV.

Sorszám	Egzakt pozíció	Számított pozíció	Abszolút eltérés	Szórás	Fél-érték szélesség
1.	90	88,2052	-1,7948	8,5529	20,1403
2.	140	139,2873	-0,7127	8,7769	20,6678
3.	200	200,0605	0,0605	10,2836	24,2158
4.	250	247,6400	-2,3600	7,1888	16,9281
5.	300	300,9745	0,9745	9,3870	22,1045
6.	400	400,3456	0,3456	9,3840	22,0974

**II.1. Táblázat. Az egzakt és a számított pozíciók, ezek abszolút eltérése és az illesztett görbék szórása valamint fél-érték szélessége zajos spektrum esetén Gauss-Seidel iterációval**

A módszer felbontóképességéről is kaphatunk információt ha az illesztett göbök fél-érték szélességét vesszük tekintetbe. Ezek szerint az algoritmussal elkülöníthetők azok a foto-csúcsok melyek távolsága nem kisebb, mint 20 csatorna, azaz energiakülönbségük nagyobb kell, hogy legyen, mint 40-80 keV, a detektor típusától, csatornaszámától függően.

### II.1.3. A GAUSS-SEIDEL ITERÁCIÓ GYORSÍTÁSA RELAXÁCIÓVAL

A relaxáció hatékony módszer iteratív eljárások konvergencia-sebességének növelésére. Bár az előző pontban 1000-2000 lépéses iterációk eredményét már elfogadtuk megoldásnak, és ehhez nagyságrendileg 10-20s időre volt csak szükség, semmi sem garantálja azt, hogy ez minden hasonló szerkezetű matematikai probléma esetén így van. Változhatnak a mátrix méretei, és előfordulhat, hogy az egyenletrendszert nem tudjuk megoldani LU-felbontással illetve Cholesky-felbontással, hanem ténylegesen ki kell számolni a mátrix inverzét esetleg általánosított inverzét. Ez nagyon számolás- és ezáltal időigényes feladat. A II.1. pontban megmutattam, hogy ilyen esetben az iteráció időigénye jelentősen megnövekedhet. Az ottani példában az időtartam 5,31s-ról 225,3s-ra növekedett, ami több mint 40-szeres szorzófaktorot jelent. Ezt hasznos lehet csökkenteni.

Először megvilágítjuk a relaxáció alapgondolatát [10,13,17]. Az iterációs formula megadja, hogyan kapjuk meg a  $(k + 1)$ -edik lépésben az  $\mathbf{x}^{(k+1)}$  közelítő vektort az  $\mathbf{x}^{(k)}$  közelítő megoldás ismeretében. Az iterációs formulát általában át lehet alakítani úgy, hogy az  $\mathbf{x}^{(k+1)} = c \cdot \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}(k)$  alakú legyen, ahol  $c \in \mathfrak{R}$  a  $\mathbf{d}(k) \in \mathfrak{R}^n$  pedig egy olyan vektor, ami általában függ a  $k$ -tól, tehát minden lépésben más. Szavakkal megfogalmazva tehát a  $(k + 1)$ -edik lépésben a közelítő megoldás úgy adódik, hogy a  $k$ -edik lépésben kapott megoldás – számszorosáéhoz, bár ez a szorzó a leggyakrabban  $c = 1 -$ , hozzáadunk egy korrekciót. A relaxáció ezt úgy módosítja, hogy a  $\mathbf{d}(k)$  korrekciós vektornak egy  $\beta$ -szorosát ( $\beta \in \mathfrak{R}$ ) adjuk a  $k$ -edik közelítéshez. Ez a  $\beta$  a relaxációs paraméter. Leggyakrabban  $\beta \in ]0, 1]$ , de vannak esetek amikor az iteráció akkor is konvergens marad, amikor  $\beta > 1$ . Mint majd látjuk, ez ebben az esetben is így lesz.

A fejezet bevezetőjében vázolt általános  $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}$  iterációs sémát ebben az esetben is egyszerűen át lehet alakítani olyan formára, amelyre már alkalmazható a relaxáció. Legyen ugyanis  $\mathbf{E} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$  az identitásmátrix. Ekkor nyilvánvaló azonos átalakításokkal a következőt kapjuk:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f} = \mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{B} - \mathbf{E})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}; \quad (2.6)$$

tehát  $\mathbf{d}(k) = (\mathbf{B} - \mathbf{E})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}$  jelöléssel éppen a kívánt alak adódik. Ha most  $\beta$  relaxációs paraméter, akkor a relaxációra alkalmas iterációs formula a következő:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \beta \cdot [(\mathbf{B} - \mathbf{E})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}]; \quad (2.7)$$

Ha ezt most alkalmazzuk a Gauss-Seidel iterációra, akkor azonos átalakítás után a (2.1) összefüggés felhasználásával a következő formulát kapjuk:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k)} - (\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1} \mathbf{U} \mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{x}^{(k)} - [\mathbf{E} + (\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1} \mathbf{U}] \mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1} \mathbf{y}; \quad (2.8)$$

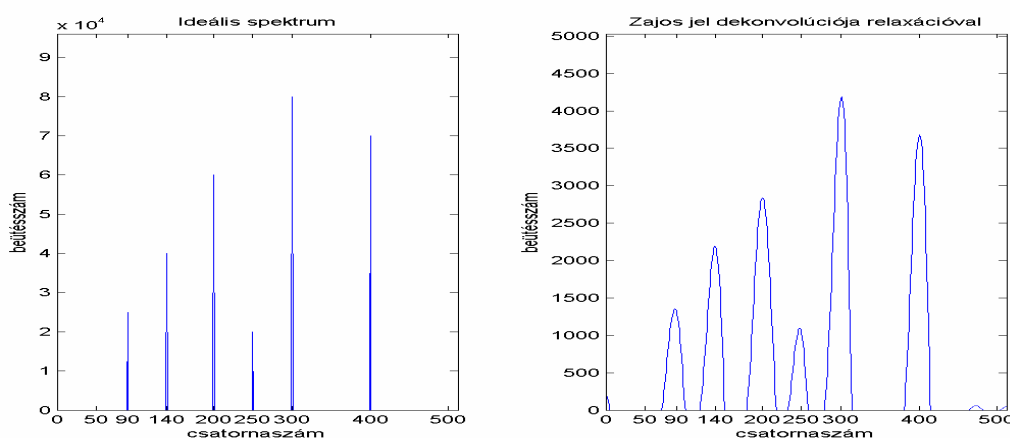
Ha itt is bevezetjük a  $\beta$  relaxációs paramétert, akkor a relaxációs formula Gauss-Seidel iteráció esetén a következő alakot ölti:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \beta \cdot \{-[\mathbf{E} + (\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1} \mathbf{U}] \mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1} \mathbf{y}\}; \quad (2.9)$$

A formula átrendezésével látható, hogy ez a Gauss-Seidel iterációnak az a módosított változata, melyben az  $\mathbf{A}$  mátrix  $\mathbf{A} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}$  felbontása után az

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{L} + \frac{1}{\beta} \mathbf{D}, \mathbf{A}_2 = \frac{\beta - 1}{\beta} \mathbf{D} + \mathbf{U}; \quad (2.10)$$

jelöléseket alkalmazzuk. A konvergencia egyik kritériuma az volt, hogy  $\mathbf{A}_1$  reguláris legyen, ami egyenértékű azzal, hogy a főátlójában nincs zérus, azaz  $\mathbf{D}$  főátlójában nincs zérus. Ha ezeket az elemeket megszorozzuk  $1/\beta$ -val, ez a tulajdonság nyilván továbbra is fennáll. Bebizonyítható, hogy a relaxáció  $\beta \in ]0, 2[$  esetén konvergens [10,13,16]. A mi feladatunk megtalálni azt a  $\beta$  paramétert, amely esetében az iteráció sebessége érezhetően nagyobb. Megjegyezzük, hogy a gyakorlatban a  $\beta \in ]0, 1[$  értékek alkalmazása a leggyakoribb, mert az iterációs algoritmusoknak gyakran éppen az a hibája, hogy az  $\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\|$  változás túl nagy, a tapasztalat szerint célszerűbb kisebb lépésekben közelíteni a megoldást.



**II.6. ábra. Zajos spektrum dekonvolúciója relaxációval**

Most alkalmazom a relaxációs módszert a zajos Gauss-spektrumra  $\varepsilon = 10^{-3}$  hibakorlát mint megállási kritérium,  $\alpha = 10^{-3}$  regularizációs paraméter és  $\beta = 0,25$  relaxációs paraméterek esetén. Az iteráció időtartama 6,656s, a lépések száma pedig 1130. A iteráció eredménye látható a II.6. ábrán. Érdeemes összevetni ezt az eredményt a II.5. ábrán szemléltetett megoldással és az ott közölt adatokkal. Relaxáció nélkül az iterációhoz 2231 lépésre volt szükség, a számítás időtartama 21,68s volt. A lépések száma a felére az időtartam pedig csaknem a negyedére csökkent. Abban az esetben, amikor relaxáció nélkül több száz vagy több ezer másodperc

szükséges a megoldás előállításához – ha pl. inverz mátrixot számoltatunk –, ez az faktor jelentős lehet! Erre egy példát említünk. Ha az iterációt  $\epsilon = 10^{-1}$ , hibakorláttal,  $\alpha = 10^{-3}$  regularizációs paraméterrel és  $\beta = 0,25$  relaxációs paraméterrel futtatjuk le a lépések száma 675, az időtartam pedig 150,625s. Relaxáció nélkül pedig 1436 lépésben kapunk eredményt 326, 406s elteltével. A relaxáció tehát valóban hatékony módszer konvergencia sebességének növelésében. Nyilvánvalóan felmerül a kérdés, hogyan választottuk meg a  $\beta$  értékét. Egyszerűen lefuttattuk az algoritmust több különböző  $\beta$  esetén és kiválasztottuk a legmegfelelőbb értéket. A tapasztalatokat a II.2. táblázatban foglaltuk össze.

$\beta$	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,4	0,5	0,7	1,0
$\Delta t$	11,109	7,578	6,781	6,656	6,969	8,016	9,703	13,094	21,680

**II.2. táblázat.** Az iteráció időtartamának függése a  $\beta$  relaxációs paramétertől  $\epsilon = 10^{-3}$  hibakorlát mint megállási kritérium esetén,  $\alpha = 10^{-3}$  regularizációs paraméter alkalmazásával

A  $\beta$  értéke nyilván az  $\mathbf{A}$  mátrix komponenseitől függ, a kapott eredmény nem univerzális, minden válasz mátrix esetében ki kell kísérletezni. A vizsgált esetben, ha  $\beta > 1$  értéket választottam, a konvergencia lassabb volt, ezért ezeket az adatokat nem is közöltem a táblázatban, bár az elmélet biztosítja a konvergenciát  $1 < \beta < 2$  értékekre is.

#### II.1.4. A VAN-CITTERT ITERÁCIÓ ÉS MÓDOSÍTOTT VÁLTOZATA

A témával foglalkozó szakirodalom gyakran idézi a Van-Cittert-től származó iterációt [30,31,34,38]. Ez közvetlenül nem alkalmas a feladat megoldására, de módosított változata már igen, ezért foglalkozunk vele. A Van-Cittert-től származó algoritmus a bevezetőben említett  $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}$  alakú iterációnak az alábbi formája:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{E} - \mu \cdot \mathbf{A}) \cdot \mathbf{x}^{(k)} + \mu \cdot \mathbf{y} \quad (2.11)$$

Ebben az esetben tehát  $\mathbf{B} = \mathbf{E} - \mu \cdot \mathbf{A}$  ahol  $\mathbf{E}$  az identitásmátrix és  $\mathbf{f} = \mu \cdot \mathbf{y}$ . A  $\mu$  egy valós paraméter, ennek értékétől függ a konvergencia. Most az a feladat, hogy a  $\mu \in \mathfrak{R}$  értékét úgy válasszuk meg, hogy az iteráció konvergáljon. Legyen az iteráció kezdőértéke  $\mathbf{x}^{(0)} = \mu \cdot \mathbf{y}$ . Ekkor a  $k$ -adik iterációs lépés eredménye a következő:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mu(\mathbf{y} + \mathbf{B}\mathbf{y} + \mathbf{B}^2\mathbf{y} + \dots + \mathbf{B}^k\mathbf{y}) = \mu(\mathbf{E} + \mathbf{B} + \mathbf{B}^2 + \dots + \mathbf{B}^k)\mathbf{y} \quad (2.12)$$

A megoldást tehát egy mátrix-hatványsor állítja elő. Ha az  $\mathbf{A}$  mátrix sajátértékeit  $\lambda_i$  jelöli, akkor a  $\mathbf{B}$  sajátértékei nyilván az  $1 - \mu \cdot \lambda_i$  valós számok. A mátrix-hatványsor konvergenciájának szükséges és elégséges feltétele, hogy  $|1 - \mu \cdot \lambda_i| < 1$  teljesüljön minden  $i = 1, 2, \dots, n$  esetén. Ha feltesszük, hogy  $\mathbf{A}$  pozitív definit, az iteráció pontosan akkor konvergens, ha minden  $i$ -re teljesül a

$$0 < \mu < \frac{2}{\lambda_i} ; \quad (2.13)$$

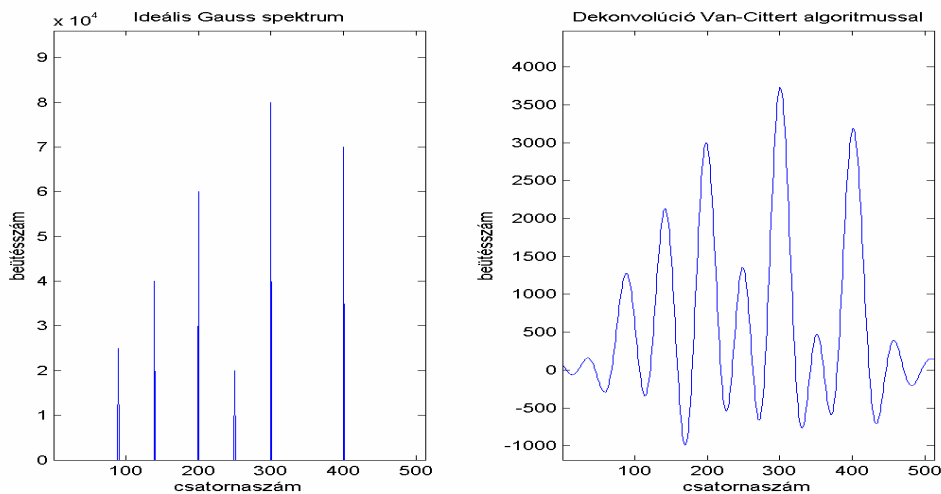
egyenlőtlenség. Legyen  $\lambda_{\max}$  az  $\mathbf{A}$  mátrix legnagyobb sajátértéke. Az előbbi  $n$  db egyenlőtlenség egyszerre teljesül az alábbi alakban:  $0 < \mu < \frac{2}{\lambda_{\max}}$ . Ez pedig pozitív szemidefinit esetben is elégséges feltétel a konvergenciához. A maximális sajátértékre vonatkozólag pedig adunk egy becslést. Az  $\mathbf{A}\mathbf{u}_i = \lambda_i\mathbf{u}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) sajátérték egyenletben az  $\mathbf{u}_i \in \mathfrak{R}^n$  sajátvektor legnagyobb komponense legyen az  $x_j \in \mathfrak{R}$  valós szám. A sajátérték egyenlet  $j$ -edik komponensére és a legnagyobb sajátértékre ekkor a

$$\sum_{p=1}^n A_{jp}x_p = \lambda_i x_j ; \quad \lambda_i = \left( \sum_{p=1}^n A_{jp}x_p \right) / x_j \quad (2.14-15)$$

összefüggések adódnak. Mivel  $x_j$  a fentiek szerint a legnagyobb komponens, ha az összegben minden  $x_p$ -t  $x_j$ -re cserélünk, akkor az alábbi egyenlőtlenséget kapjuk:

$$\lambda_i \leq \sum_{p=1}^n |A_{jp}| \quad (2.16)$$

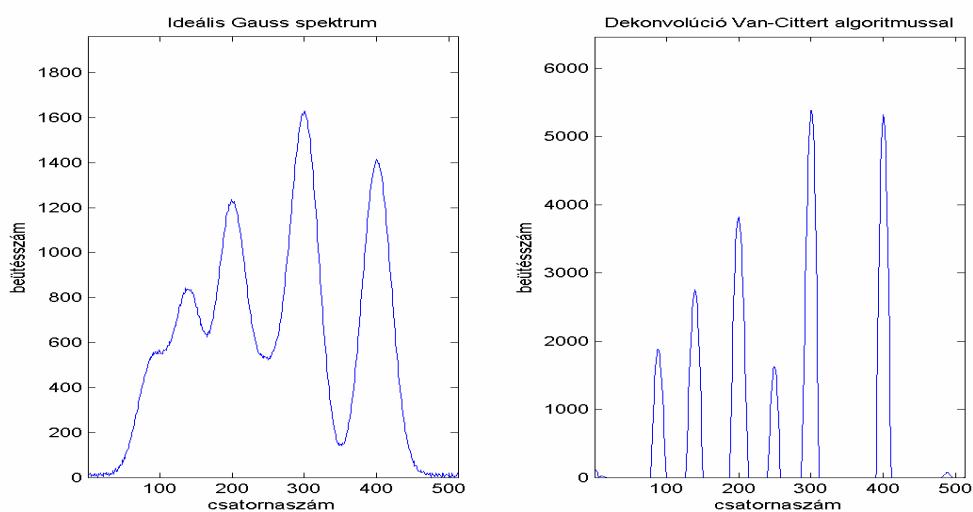
( $i = 1, 2, \dots, n$ ). A jobboldali összeg az  $\mathbf{A}$  mátrix  $j$ -edik sorában található elemek abszolút értékeinek összege. A  $\lambda_{\max}$  sajátértéket, mint ezen sorösszegek maximumát határozzuk meg. Ennek alapján választjuk meg a  $\mu$  paramétert. Ehhez kiszámítjuk a  $\lambda_{\max}$  felső becslését, jelölje ezt  $S$ , és a  $\mu$  paramétert  $\mu = \gamma \cdot S$  módon állítjuk elő, ahol  $\gamma \in ]0, 1[$ . Alkalmazzuk a Van-Cittert algoritmust 1000 lépésben a zajos Gauss-spektrumra  $\gamma = 0,5$  érték mellett. Az iteráció időtartama 6,484s az eltérés normája pedig 4,812. A megoldás a II.7. ábrán látható.



**II.7. ábra. Zajos spektrum dekonvolúciója Van-Cittert algoritmusával**

Ha összehasonlítjuk ezt az eredményt azzal, amit a Gauss-Seidel iterációval kaptunk és amit a II.1. ábrán láthatunk, kijelenthetjük, hogy kísértetiesen hasonlít a két megoldás, bár a két algoritmus elvileg különbözik egymástól. Ugyanannyi lépéshez ez utóbbi esetben nagyjából

kétszer annyi idő szükséges, de határozott előnye a Van-Cittert algoritmusnak hogy ez pozitív szemidefinit mátrix esetén is konvergál, így nincs szükség regularizációra. Viszont a megoldás ugyanúgy nem használható. Oszcilláló, tartalmaz negatív komponenseket, és ugyanúgy megjelennek hamis csúcsok, tehát a megoldás megbízhatatlan. A tapasztalat szerint ezen az sem változtat, ha a  $\gamma$  paraméter értékét módosítjuk ]0, 1[-ben. De alkalmazzuk azt a fogást, ami a Gauss-Seidel iterációt is használhatóvá tette. Vágjuk le a negatív megoldásokat minden iterációs lépésben, tehát vetítsünk minden lépésben az  $\Omega$  halmazra. Hogy össze tudjuk hasonlítani az eredményeket alkalmazzunk egy 2231 lépéses iterációt, pontosan úgy mint a II.5. ábrán vázolt megoldás esetében. A II.8. ábrán látható a megoldás.



**II.8. ábra. „Pozitív szemidefinit” Van-Cittert iteráció zajos spektrumra alkalmazva**

Hasonlítsuk össze kvantitatív módon a két iterációt! Az időtartam 14,141s, tehát az algoritmus gyorsabb. Nagyobb súllyal szerepel azonban a csúcsok pozíciója és az illesztett Gauss-ok szórása, vagy ami ezzel arányos, a fél-érték szélessége. Ezek között ránézésre is felfedezhető némi különbség. A II.3. táblázat tartalmazza az adatokat. Összevetve ezen táblázat adatait a II.1. táblázat adataival, világosan látható, a pozitív szemidefinit Van-Cittert algoritmus két szempontból is hatékonyabb. Egyrészt a csúcsok pozícióját pontosabban határozza meg. Megmarad az a tulajdonság, hogy az eltakart foto-csúcsok pozíciója bizonytalanabb, de a bizonytalanság legfeljebb 1 cella, azaz 2-4 keV, szemben a korábbi 4-12 keV hibával, ami egy 3-szoros faktort jelent. Legalább ennyire fontos a szórások összehasonlítása. Látható, hogy a Gauss-Seidel iteráció esetében a szórások nagyjából 50 %-kal nagyobbak mint a Van-Cittert iteráció esetében. Ez másképpen fogalmazva azt jelenti, hogy az utóbbi felbontóképessége jobb, a két módszer felbontóképességének aránya nagyjából 2/3 a javított Van-Cittert módszer javára. Ki kell emelnünk még a felbontóképességek viszonyát is. Az utóbbi módszer energiafelbontó képessége a Gauss-Seidel iteráció felbontásához viszonyítva nagyjából 30-50 %-kal jobb.

Sorszám	Egzakt pozíció	Számított pozíció	Abszolút eltérés	Szórás	Félérték szélesség
1.	90	89,2286	-0,7714	5,4630	12,8642
2.	140	139,7475	-0,2525	6,0558	14,2602
3.	200	199,9148	-0,0852	6,6419	15,6403
4.	250	249,5132	-0,4868	4,3116	10,1529
5.	300	300,1954	0,1954	6,3494	14,9515
6.	400	399,9705	-0,0295	5,5875	13,1280

II.3. táblázat. Az egzakt és a számított pozíciók, ezek abszolút eltérése és az illesztett Gauss-görbék szórása valamint félérték szélessége Van-Cittert iteráció esetén

## II.1.5. A GOLD-FÉLE ITERÁCIÓ ÉS JAVÍTOTT VÁLTOZATA

Létezik a Van-Cittert iterációnak egy másik olyan módosított változata, amely eleve pozitív szemidefinit, azaz minden egyes iterációs lépésben kizárólag nem negatív megoldásokat kapunk [31,39]. Ehhez annyit kell tenni, hogy a II.11. iterációs formulát kissé módosítjuk. Ha az említett egyenletet az

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mu(\mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}) \quad (2.17)$$

alakban írjuk fel, nyilván semmi sem módosul, a konvergencia feltétele ugyanaz, tehát a (2.13) feltétel teljesülése. Válasszuk meg a  $\mu$  paramétert extrémisan, a (2.13) és (2.15) összefüggések figyelembevételével a  $k$ -edik iterációs lépésben a paraméter értéke legyen a

$$\mu = \frac{1}{\lambda_i} = \frac{x_i^{(k)}}{\sum_{p=1}^n A_{jp} x_p^{(k)}} \quad (2.18)$$

definícióval adva. Ha ezt a formulát a (2.17)-ben  $\mu$  helyére helyettesítjük, akkor megkapjuk az iterációs formulát, amelyben a zárójelet felbontása és összevonás után egy igen egyszerű iterációs formulát adódik:

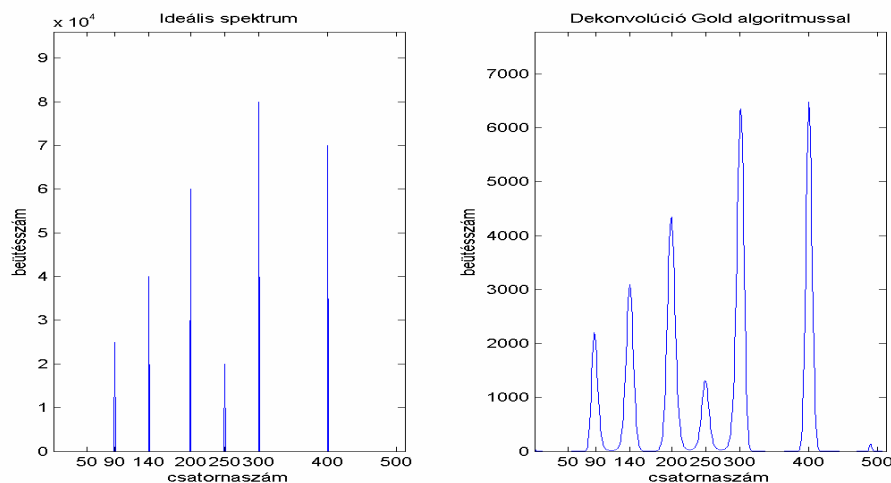
$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{x_i^{(k)}}{\sum_{p=1}^n A_{jp} x_p^{(k)}} \left[ y_i - \sum_{p=1}^n A_{jp} x_p^{(k)} \right]; \quad x_i^{(k+1)} = \frac{y_i}{\sum_{p=1}^n A_{jp} x_p^{(k)}} x_i^{(k)} \quad (2.19-2.20)$$

Ha az iteráció kezdőértékéül az  $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{1} \in \mathfrak{R}^n$  vektort választjuk, és az (2.20) iterációs formulát alkalmazzuk, akkor kapjuk a Gold-féle dekonvolúciós eljárást. Nagy előnye a Gold-féle dekonvolúciónak a Van-Cittert algoritmushoz képest, hogy minden megoldás kizárólag nem negatív komponensekből áll, hiszen az  $\mathbf{A}$  mátrixnak nincsenek negatív komponensei és az iteráció kezdőértéke is pozitív így (2.20)-ban minden elem, minden lépésben nem negatív.

Alkalmazom a Gold-algoritmust az összehasonlítás kedvéért ugyanarra a zajos spektrumra, amit a korábbiakban is többször vizsgáltunk, ugyancsak 2231 lépés alkalmazásával. A



számítások időtartama 19,59s, az iteráció utolsó lépésében az eltérés normája 3,25. A megoldást mutatja a II.9. ábra.



II.9. ábra. Zajos spektrum dekonvolúciója Gold-iterációval

A II.4. táblázatban foglaltam össze a megoldás tulajdonságait.

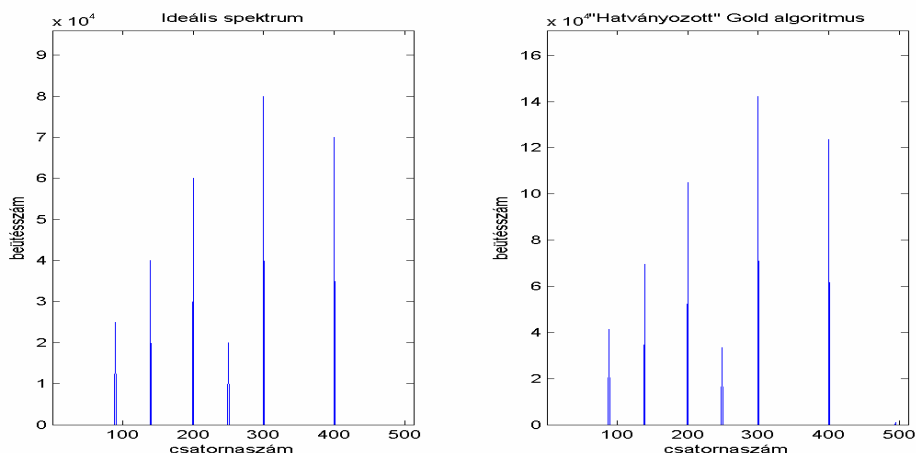
Sorszám	Egzakt pozíció	Számított pozíció	Abszolút eltérés	Szórás	Félérték szélesség
1.	90	88,1980	-1,8020	4,3643	10,2772
2.	140	139,4640	-0,5360	5,0392	11,8663
3.	200	199,7428	-0,2572	5,4704	12,8818
4.	250	249,2228	-0,7772	5,1827	12,2044
5.	300	300,4963	0,4963	4,9599	11,6798
6.	400	399,9512	-0,0488	4,4050	10,3730

II.4. táblázat. Az egzakt és a számított pozíciók, ezek abszolút eltérése és az illesztett Gauss-görbék szórása valamint félérték szélessége Gold-iteráció esetén

Összehasonlítva ezt a Gauss-Seidel és a Van-Cittert iteráció szolgáltatja megoldásokkal kijelenthetjük, hogy az említett iterációs eljárások között ennek a módszernek a legjobb a felbontóképessége, a fél-érték szélesség a felére csökkent, azaz a G-S. algoritmus „maximális” felbontásához képest fele olyan távolságra levő csúcsok is felbonthatók, elkülöníthetők.

Azonban az eljárás tovább javítható. Használjuk ki, hogy a megoldások nem negatívak. Hangsúlyozzuk a csúcsok pozícióját úgy, hogy az iteráció során akár mindegyik lépésben, vagy akár csak minden L-edik (10. vagy 50. vagy 100. ...) lépésben vesszük az adott iterációs közelítés  $\mathbf{x}^{(k)}$  minden elemének valamilyen  $\delta$  kitevőjű hatványát – ahol  $\delta > 1$ , és  $\delta$  csak kevéssé különbözik 1-től, lehet például  $\delta = 1,01; 1,05; 1,1; \dots$  stb. –, és az iterációt ezzel a hatványozott értékkel számoljuk tovább. Ennek optimális értékét szintén az algoritmusok futtatása útján, a tapasztalatból célszerű meghatározni. Alkalmazzuk most ezt a „hatványozott” iterációt a már megszokott spektrumra. A lépésszám az összevetés kedvéért 2231, a számítások időtartama

19,98s és az iteráció utolsó lépésében az eltérés normája 3,84. A  $\delta$  hatványkitevő értéke 1,05 és  $L = 10$ , azaz minden 10. lépésben képeztük a  $k$ -adik közelítés  $\delta$ -kitevőjű hatványát. A megoldás a II.10. ábrán látható.



**II.10. ábra. Zajos spektrum dekonvolúciója „hatványozott” Gold-algoritmussal**

Igen lényeges különbség az eddigi megoldásokhoz képest, hogy ezzel az algoritmussal gyakorlatilag visszakaptuk az ideális energiaspektrum Dirac-féle delta függvényeit. Ha a pozíciókra vagyunk kíváncsiak és a fél-érték szélességre, akkor csődöt mond a görbeillesztés módszere, hiszen gyakorlatilag nincs szélessége az egyes csúcsoknak. Ha kiíratjuk koordinátánként a megoldást, akkor azt látjuk, hogy minden csúcs egyetlen cellára korlátozódik, márpedig egyetlen pontra nem illesztünk sem Gauss-görbét sem másodfokú polinomot. Nincs más dolgunk tehát, mint leolvasni a nullától különböző értékek pozícióját, és kezünkben a megoldás. Ezt tartalmazza a II.5. táblázat. Ennél jobb felbontású megoldásra pedig nincs szükség. Mint látható, annak ellenére, hogy éles spektrumvonalak adódtak megoldásként, nem kaptuk vissza minden vonal pozícióját pontosan. A nagy amplitúdójú, karakteres vonalak pozíciója pontosan adódik, de a kisebb intenzitású, a nagy intenzitásúak által részben vagy egészen eltakart csúcsok pozíciójában egy csatornát tévedünk.

<b>Egzakt pozíció</b>	<b>90</b>	<b>140</b>	<b>200</b>	<b>250</b>	<b>300</b>	<b>400</b>
<b>Számított Pozíció</b>	<b>89</b>	<b>139</b>	<b>200</b>	<b>249</b>	<b>300</b>	<b>400</b>
<b>Beütésszám</b>	<b><math>4,1406 \cdot 10^4</math></b>	<b><math>6,9852 \cdot 10^4</math></b>	<b><math>1,0498 \cdot 10^5</math></b>	<b><math>3,3440 \cdot 10^4</math></b>	<b><math>1,4230 \cdot 10^5</math></b>	<b><math>1,2366 \cdot 10^5</math></b>

**II.5. táblázat. A spektrumvonalak eredeti és a számított pozíciói „hatványozott” Gold-algoritmussal**

Sokszor lefuttattam az algoritmust különböző  $L$  és  $\delta$  értékekkel, és a tapasztalat azt mutatja, hogy ez az egy egységnyi eltolódás nem korrigálható, sőt minél nagyobbak választjuk a  $\delta$  kitevő értékét, az eltolódás annál nagyobb, akár 2-3 pozíció is adódhat, de csak a relatíve kis intenzitású csúcsoknál. Tehát nem érdemes a  $\delta$  értékét nagyon megnövelni, minél kevésbé tér el

1-től, a megoldás annál pontosabb. Ez melleleg azt is jelenti, hogy a hatványozás nem jelenti a probléma ideális megoldását. A későbbiekben tárgyalt algoritmusok esetében is igaz, hogy fokozottan érzékenyek a  $\delta$  kitevőre.

## II.2. DEKONVOLÚCIÓ MINT OPTIMALIZÁLÁSI PROBLÉMA, MEGOLDÁS KVADRATIKUS PROGRAMOZÁSI FELADATKÉNT

Ebben a pontban a matematikai programozás apparátusának alkalmazom. A témakör részletesen kidolgozva megtalálható a [40-46] kötetekben ill. cikkekben. Induljunk ki az eredetileg kitűzött  $\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  egyenletrendszerből, de most ennek direkt megoldása helyett közelítsük meg más módon a problémát. Mivel az általános esetben  $r(\mathbf{R}) < n$ , ahol  $\mathbf{R} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ , az egyenletrendszerben kevesebb független egyenlet van mint ismeretlen – „alulhatározott” –, tehát az rendszernek elvileg végtelen sok megoldása van tetszőleges  $\mathbf{y} \in \mathfrak{R}^n$  esetén. Állapodjunk meg abban, hogy ebben a pontban más értelemben keressük az egyenletrendszer megoldását mint az előzőekben. Ésszerűnek tűnik azt az  $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$  megoldást megkeresni, amelyre az  $\mathbf{R}\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$  vektor az  $\mathbf{y}$ -hoz a legközelebb van. Mivel a rangra tett feltevések miatt az  $\mathbf{R}$  mátrix  $N(\mathbf{R})$  magtere nem triviális, tehát van null-vektortól különböző eleme, így a megoldás nem egyértelmű. Ennek fényében az is logikus követelmény lehet, hogy válasszuk ki ezek közül a minimális normájú megoldást.

Az  $\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  egyenletrendszer **legjobb közelítő megoldásának** nevezzük az  $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$  vektort, ha teljesül rá, hogy

$$\|\mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y}\| = \inf \{ \|\mathbf{R}\mathbf{z} - \mathbf{y}\| \mid \mathbf{z} \in \mathfrak{R}^n \} \quad (2.21)$$

Mivel a magtér nem triviális, általában végtelen sok olyan  $\mathbf{x}$  van, amelyre  $\mathbf{R}\mathbf{x}$  a legjobb közelítés.

Az  $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$  vektor **minimális normájú megoldás**, ha

$$\|\mathbf{x}\| = \inf \{ \|\mathbf{z}\| \mid \mathbf{z} \in \mathfrak{R}^n \text{ legjobban közelítő megoldás} \} \quad (2.22)$$

Ha a (2.21) értelemben létezik megoldás, akkor a (2.22) megoldás egyértelmű, hiszen egy szigorúan konvex, másodfokú függvény minimumhelye egy lineáris altéren, ezt az alábbiakban igazoljuk. Fogalmazzuk meg a problémát tehát optimalizálási feladatként! Minimalizáljuk a

$\Phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2; \mathbf{x} \geq 0$  függvényt, azaz keressük meg és fogadjuk el azt a vektort megoldásnak, amelyik a  $\Phi(\mathbf{x})$  valós függvényt minimalizálja. Ha a hibát – elég nyilvánvaló módon – az  $\mathbf{r} = \mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y}$  formulával értelmezzük, akkor a kitűzött feladat egyenértékű a hiba nagyságának minimalizálásával, ami a megoldással szembeni természetes követelménynek tekinthető. A norma definíciója a skaláris szorzat valamint a mátrix transzponálás műveleti tulajdonságai szerint a valós értékű  $\Phi(\mathbf{x}) = \Phi(x_1, x_2, \dots, x_n)$  függvény az alábbi alakban írható:

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 &= \langle \mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle = (\mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y})^* (\mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \\
&= (\mathbf{R}\mathbf{x})^* \mathbf{R}\mathbf{x} - (\mathbf{R}\mathbf{x})^* \mathbf{y} - \mathbf{y}^* (\mathbf{R}\mathbf{x}) + \mathbf{y}^* \mathbf{y} = \mathbf{x}^* \mathbf{R}^* \mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{x}^* \mathbf{R}^* \mathbf{y} - \mathbf{y}^* \mathbf{R}\mathbf{x} + \mathbf{y}^* \mathbf{y} = \\
&= \mathbf{x}^* \mathbf{R}^* \mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y}^* \mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y}^* \mathbf{R}\mathbf{x} + \mathbf{y}^* \mathbf{y} = \mathbf{x}^* \mathbf{R}^* \mathbf{R}\mathbf{x} - 2\mathbf{x}^* \mathbf{R}^* \mathbf{y} + \mathbf{y}^* \mathbf{y}
\end{aligned} \tag{2.23}$$

ahol  $\langle \cdot ; \cdot \rangle$  jelöli a skaláris szorzatot. A  $\Phi(\mathbf{x})$  valós értékű  $n$ -változós függvény minimumát a deriváltjának (gradiensének) nulla helyei között kereshetjük:

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{R}^* \mathbf{R}\mathbf{x} - 2\mathbf{R}^* \mathbf{y} = \mathbf{0} \tag{2.24}$$

Ha osztunk 2-vel a következő egyenletet kapjuk:

$$\mathbf{R}^* \mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{R}^* \mathbf{y} \tag{2.25}$$

Jelen eredményünk azt jelenti, hogy a minimális hibát jelentő megoldás éppen a Gauss-féle normálegyenlet megoldása. Ezzel tehát még nem jutottunk előbbre, de gondoljuk továbbra is úgy az egyenletrendszerre, mint egy szélsőérték problémára. A (2.23) összefüggés szerint a  $\Phi(\mathbf{x})$  valós függvény egy kvadratikus alak, vagyis lényegében egy másodfokú függvény. Kamatoztassuk azt amit a II.1. és II.2. pontokban a problémával kapcsolatban kiderítettünk. Az  $\mathbf{R}^* \mathbf{R}$  mátrix pozitív szemidefinit, regularizációval pozitív definit mátrixszá tehető. Ebben az esetben pedig a (2.23)-nak megfelelő kvadratikus alak, tehát a  $\Phi(\mathbf{x})$  függvény szigorúan konvex, innen következik, hogy a (2.22) minimális normájú megoldás valóban egyértelműen létezik. Vessük be most a matematikai programozás apparátusát a feladat megoldására [40,46]. A regularizációt most a következő módon végezzük el. A  $\Phi(\mathbf{x})$  függvényt egészítsük ki az alábbi módon:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \frac{\alpha}{2} \|\mathbf{x}\|^2; \mathbf{x} \geq 0 \tag{2.26}$$

Azaz a hiba normájának minimalizálásával egyidejűleg minimalizáljuk a magának az megoldásnak a normáját is, hiszen ez a (2.22) kívánalom egyenes következménye. Megmutatjuk, hogy ez a lépés valóban az előző két fejezetben már megismert regularizáció egy esete. Fejtsük ki a  $\Phi(\mathbf{x})$  függvényt ismét a norma definíciója szerint:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \frac{\alpha}{2} \|\mathbf{Q}\mathbf{x}\|^2 = \frac{1}{2} (\mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y})^* (\mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \frac{\alpha}{2} (\mathbf{Q}\mathbf{x})^* (\mathbf{Q}\mathbf{x}) \tag{2.27}$$

Ha (2.27)-ben elvégezzük a skaláris szorzat kifejtését, alkalmazzuk a disztributív törvényt, a kommutativitást és a szorzat transzponálására vonatkozó összefüggést – ahogyan (2.23)-ban –, akkor a következő adódik:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^* \mathbf{R}^* \mathbf{R}\mathbf{x} - \mathbf{x}^* \mathbf{R}^* \mathbf{y} + \frac{1}{2} \mathbf{y}^* \mathbf{y} + \frac{\alpha}{2} \mathbf{x}^* \mathbf{Q}^* \mathbf{Q}\mathbf{x} \tag{2.28}$$

Most képezzük  $\Phi(\mathbf{x})$  deriváltját (gradiensét) és tegyük egyenlővé zérus vektoral:

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{R}^* \mathbf{R} \mathbf{x} - \mathbf{R}^* \mathbf{y} + \alpha \mathbf{Q}^* \mathbf{Q} \mathbf{x} = (\mathbf{R}^* \mathbf{R} + \alpha \mathbf{Q}^* \mathbf{Q}) \mathbf{x} - \mathbf{R}^* \mathbf{y} = \mathbf{0} \quad (2.29)$$

Ez pedig éppen az  $\mathbf{A} = \mathbf{R}^* \mathbf{R}$  mátrix regularizációja a szokott értelemben  $\alpha$  regularizációs paraméterrel. A  $\mathbf{Q}$  mátrix a regularizáció konkrét módjától függően sokféle lehet, mi az alábbiakban a legegyszerűbbet választjuk. Legyen  $\mathbf{Q} = \mathbf{E}$  az identitásmátrix. Ez a Tyihonov féle regularizáció. (Megjegyezzük, hogy nincs különösebb haszna annak, ha bonyolultabb szerkezetű mátrixot alkalmazunk az identitásmátrix helyett. A szakirodalom [30-35] szerint a megoldások tulajdonságai nem javulnak számottevően.)

Ha most (2.27)-ben használjuk a már korábban is bevezetett  $\mathbf{A} = \mathbf{R}^* \mathbf{R} + \alpha \mathbf{Q}^* \mathbf{Q}$  jelet valamit a félreértést nem okozó  $\mathbf{R}^* \mathbf{y} = \mathbf{y}' = \mathbf{y}$  jelölést, és a konstansokat elhagyjuk – ezt megtehetjük, mivel ez a lépés nem változtatja meg a szélsőérték helyeket –, akkor az alábbi kvadrátikus programozási feladatot kapjuk:

$$\text{Minimalizálandó } \Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{x}^* \mathbf{y}; \text{ feltéve, hogy } \mathbf{x} \geq \mathbf{0}; \quad (2.30)$$

Ha az  $\alpha$  paraméter pozitív szám akkor ez egy pozitív definit kvadrátikus alak, azaz más tulajdonságot hangsúlyozva, egy szigorúan konvex másodfokú függvény. Ennek keressük a szélsőértékét.

## II.2.1. A KONJUGÁLT GRADIENS MÓDSZER

A megoldást a matematikai programozás egyik hatékony algoritmusával a **konjugált gradiens módszerrel** (a továbbiakban röviden: CG-módszer) állítjuk elő [47-51]. A bevezetett jelölésekkel megoldandó tehát a  $\Phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \rightarrow \text{minimum}; \mathbf{x} \geq \mathbf{0}$  feltételes szélsőérték feladat.

A nulladik lépésben legyen a közelítő megoldás  $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0} \in \mathfrak{R}^n$ , és a hiba kezdeti értéke  $\mathbf{r}^{(0)}$ . Ha ez utóbbi a nullvektor, akkor megtaláltuk a megoldást. Ha  $\mathbf{r}^{(0)} \neq \mathbf{0}$ , akkor közelítsünk a megoldáshoz a  $\mathbf{v}^{(0)} = -\mathbf{r}^{(0)}$  vektor irányában, tehát legyen az első iterációs lépésben a közelítő megoldás  $\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \lambda_0 \mathbf{v}^{(0)}$ . Általában, ha a  $k$ -edik lépésben ismerjük a megoldást akkor a  $(k + 1)$ -edik lépésben a közelítés legyen  $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \lambda_k \mathbf{v}^{(k)}$ . A  $\lambda_k$  szorzót abból a feltételből határozzuk meg, hogy  $\Phi(\mathbf{x}^{(k+1)})$  legyen minimális. Mivel

$$\Phi(\mathbf{x}^{(k+1)}) = \Phi(\mathbf{x}^{(k)} + \lambda_k \mathbf{v}^{(k)}) = \Phi(\mathbf{x}^{(k)}) + \lambda_k \cdot \langle \mathbf{r}^{(k)}, \mathbf{v}^{(k)} \rangle + \frac{1}{2} \lambda_k^2 \langle \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)}, \mathbf{v}^{(k)} \rangle \quad (2.31)$$

$\lambda_k$ -ban másodfokú polinom, szélsőérték helye azonnal felírható:

$$\lambda_{\mathbf{k}} = -\frac{\langle \mathbf{r}^{(\mathbf{k})}, \mathbf{v}^{(\mathbf{k})} \rangle}{\langle \mathbf{A}\mathbf{v}^{(\mathbf{k})}, \mathbf{v}^{(\mathbf{k})} \rangle} \quad (2.32)$$

Ezzel tehát megkaptuk az  $\mathbf{x}^{(\mathbf{k}+1)}$  közelítést. Ha  $\mathbf{A}\mathbf{x}^{(\mathbf{k}+1)} = \mathbf{y}$ , akkor megkaptuk az egzakt megoldást. Ha viszont  $\mathbf{A}\mathbf{x}^{(\mathbf{k}+1)} - \mathbf{y} \neq \mathbf{0}$ , akkor az eltérésvektor  $\mathbf{r}^{(\mathbf{k}+1)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(\mathbf{k}+1)} - \mathbf{y}$  felhasználásával kijelölünk egy újabb irányt:

$$\mathbf{v}^{(\mathbf{k}+1)} = -\mathbf{r}^{(\mathbf{k}+1)} + \mu_{\mathbf{k}}\mathbf{v}^{(\mathbf{k})} \quad (2.33)$$

amelynek teljesítenie kell az  $\langle \mathbf{A}\mathbf{v}^{(\mathbf{k}+1)}, \mathbf{v}^{(\mathbf{k})} \rangle = \mathbf{0}$  feltételt. Ez a feltétel azt jelenti, hogy az  $\mathbf{A}\mathbf{v}^{(\mathbf{k}+1)}$  és a  $\mathbf{v}^{(\mathbf{k})}$  vektorok merőlegesek egymásra, más szóhasználattal  $\mathbf{v}^{(\mathbf{k}+1)}$  és  $\mathbf{v}^{(\mathbf{k})}$  az  $\mathbf{A}$ -ra vonatkozólag konjugáltak. A konjugáltság feltétele szerint:

$$\langle \mathbf{A}\mathbf{v}^{(\mathbf{k}+1)}, \mathbf{v}^{(\mathbf{k})} \rangle = -\langle \mathbf{A}\mathbf{r}^{(\mathbf{k}+1)}, \mathbf{v}^{(\mathbf{k})} \rangle + \mu_{\mathbf{k}}\langle \mathbf{A}\mathbf{v}^{(\mathbf{k})}, \mathbf{v}^{(\mathbf{k})} \rangle = 0 \quad (2.34)$$

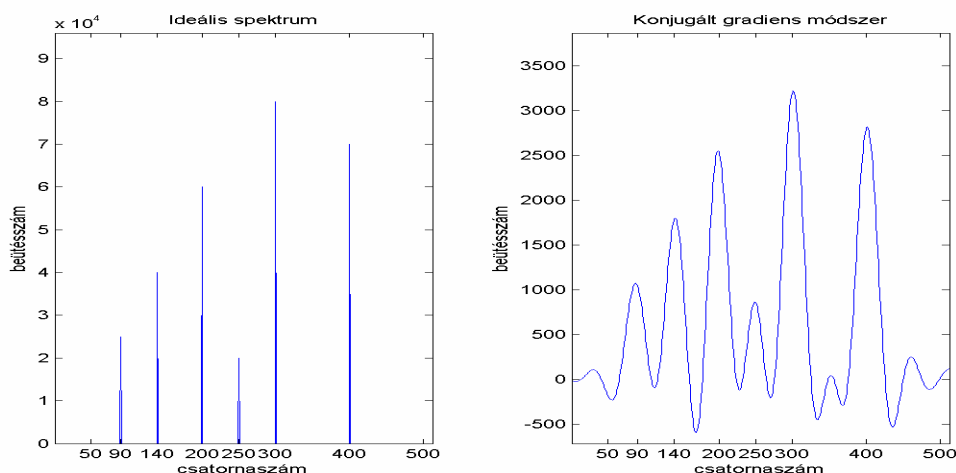
amiből következik, hogy  $\mu_{\mathbf{k}}$  értéke

$$\mu_{\mathbf{k}} = \frac{\langle \mathbf{A}\mathbf{r}^{(\mathbf{k}+1)}, \mathbf{v}^{(\mathbf{k})} \rangle}{\langle \mathbf{A}\mathbf{v}^{(\mathbf{k})}, \mathbf{v}^{(\mathbf{k})} \rangle} \quad (2.35)$$

A konjugált gradiens módszer a fenti iteráció. Az elnevezést indokolandó, képezzük a (2.30) alapján a  $\Phi(\mathbf{x})$  gradiensét, azaz deriváljunk parciálisan  $\mathbf{x}$  minden koordinátája szerint a  $\mathbf{k}$ -edik lépésben. Világos, hogy a  $\text{grad}\Phi(\mathbf{x}^{(\mathbf{k})}) = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(\mathbf{k})} - \mathbf{y}$  vektort kapjuk, ez pedig éppen a  $\mathbf{r}^{(\mathbf{k})}$  vektor, a  $\mathbf{v}^{(\mathbf{k})}$  pedig a  $\mathbf{k}$ -nál nem nagyobb indexű  $\mathbf{r}^{(\mathbf{k})}$ -k, tehát a gradiensek lineáris kombinációja.

Megállási kritériumként adott  $\varepsilon > 0$  esetén itt is előírhatjuk a korábban már többször alkalmazott  $\|\mathbf{x}^{(\mathbf{k}+1)} - \mathbf{x}^{(\mathbf{k})}\| < \varepsilon$  vagy akár a  $\|\mathbf{A}\mathbf{x}^{(\mathbf{k})} - \mathbf{y}\| < \varepsilon$  feltételt. A konjugált gradiens módszer legnagyobb előnye, hogy legfeljebb  $n$  lépésben – ahol  $n$  az  $\mathbf{A}$  mátrix rendje – biztosan eléri a határértéket, tehát a lépésszám biztosan korlátozott.

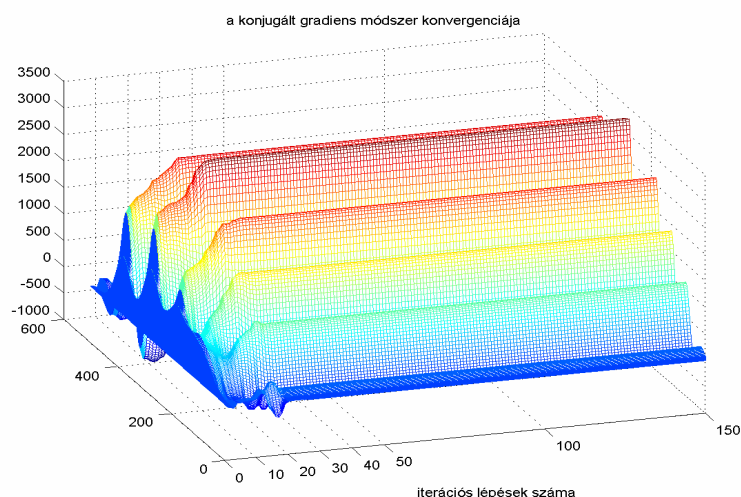
Alkalmazzuk ezt az algoritmust a szokásos zajos spektrumra. Az eredmény a II.11. ábrán látható. A kapott megoldást  $\alpha = 1,7 \cdot 10^{-3}$  regularizációs paraméter alkalmazásával kaptuk. Ránézésre úgy tűnik, hogy nem sokat nyertünk azzal, hogy szélsőérték problémaként kezeltük a problémát. Egyrészt a megoldás nem pozitív szemidefinit, a csúcsok meglehetősen nagy szórású eloszlásgörbékkel írhatók le, tehát a felbontás nem jobb, mint a korábbi estekben sőt rosszabb, a csúcsok pozícióiban is nagyjából azonos mértékű hiba jelentkezik (II.6. táblázat), adódtak – bár kis intenzitással – hamis csúcsok, és ki kell emelnünk, hogy az algoritmus meglehetősen érzékeny a  $\alpha$  paraméter értékére. Ha  $\alpha$  egy-két nagyságrenddel kisebb, mint az általunk választott, akkor egyre több hamis csúcs adódik, ha viszont ugyancsak egy-két nagyságrenddel nagyobb, akkor pedig nem bontja szét a csúcsokat.



**II.11. ábra. Zajos spektrum dekonvolúciója konjugált gradiens módszerrel, 150 iterációs lépés alkalmazásával**

Mindazonáltal kiemeljük, hogy mindössze 150 lépéses iterációt kellett alkalmaznunk, a szükséges időtartam elhanyagolható, mindössze 0,76s és már ekkor a szomszédos megoldások különbségének a normája  $\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| = 7,29 \cdot 10^{-11}$ , a konvergencia tehát nagyon lassú.

Másrészt a keresett megoldástól való eltérés normája még kisebb  $\|\mathbf{Ax}^{(k)} - \mathbf{y}\| = 1,30 \cdot 10^{-11}$ , tehát levonhatjuk a következtetést, hogy a szélsőérték feladatot eredményesen megoldja a konjugált gradiens módszer, de mivel regularizálni voltunk kénytelenek, nem várhatjuk el, hogy a megoldás a kívánt Dirac-deltákból álljon.

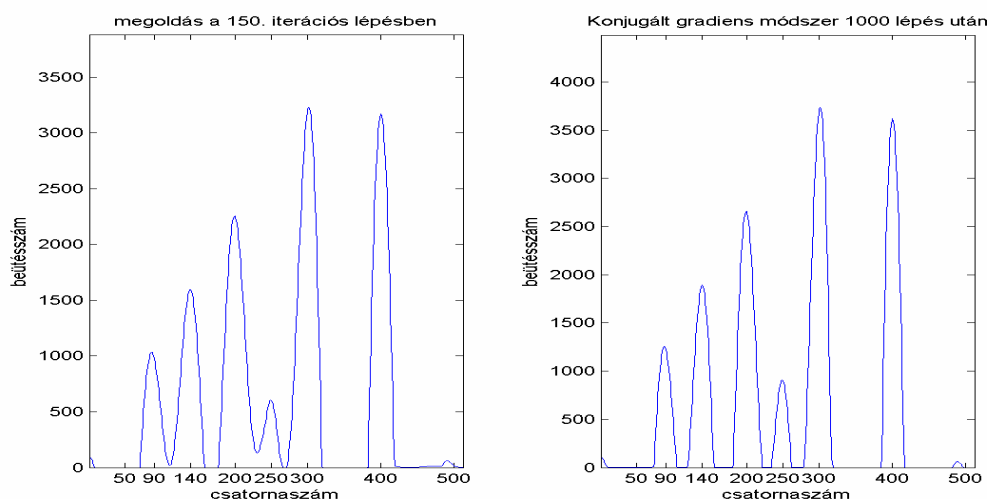


**II.12. ábra. A CG-algoritmus konvergenciája**

A módszer konvergenciájának sebességét érzékeltetjük a II.12. ábrán, ahol az egyes iterációs lépésekben kapott megoldásgörbéket egyetlen felületként ábrázoltuk. Jól látható az ábráról, hogy a megoldás lényeges tulajdonságokat tekintve gyakorlatilag már a 30. lépés után alig változik, a szomszédos közelítő megoldások eltérésének normája  $10^{-11}$  nagyságrendű. A mondottak ellenére azonban reményt keltő az, hogy az algoritmus a szélsőérték feladatot igen jó közelítéssel

megoldja tehát érdemes a javításán gondolkodni. Ezt tesszük egyrészt a II.2.2. pontban, ahol megvizsgáljuk a prekondicionálás hatékonyságát és a II.3. pontban, ahol az algoritmust az aktív halmazok módszerével ötvözöm majd.

További kétségtelen hátránya a módszernek, hogy a megoldás nem pozitív szemidefinit. Ezen könnyen segíthetünk, ha az algoritmust úgy módosítjuk, hogy minden iterációs lépésben képezzük a kapott megoldás projekcióját a megengedett megoldások  $\Omega$  halmazára. Ezzel a konvergenciát nem befolyásoljuk, csak minden iterációs lépésben egy a keresett megoldáshoz közelebbi megoldást választunk. Ekkor a II.13. ábrán látható eredményt kapjuk, amelyen két közelítő megoldás látható, az egyik 150 lépés után – hogy a II.11. ábrán látott megoldással összevethessük –, valamint 1000 lépés után. Természetesen ezen is jól látható, hogy a megoldás keveset változik.



**II.13. ábra. Pozitív szemidefinit konjugált gradiens módszerrel kapott megoldás 150 és 1000 lépés után**

A két ábrázolt megoldásra vonatkozólag az  $\|Ax^{(k)} - y\|$  eltérés rendre 355,1 illetve 242,6. A szükséges időtartam 0,82s illetve 13,4s. Ezek az adatok is alátámasztják a lassú konvergenciára vonatkozó megállapítást. A megoldások további adatait tartalmazza a II.6. táblázat.

Egzakt pozíció	90	140	200	250	300	400
Pozíció 150 lépés után	86,62	138,90	199,81	248,8	300,65	399,82
Félérték szélesség	23,91	27,09	29,81	19,26	28,37	25,87
Pozíció 1000 lépés után	88,12	139,23	199,89	248,70	300,36	399,88
Félérték szélesség	17,20	22,69	25,29	20,64	23,78	21,72

**II.6. táblázat. A II.15. ábrán látható megoldások által adott pozíciók és fél-érték szélességek**

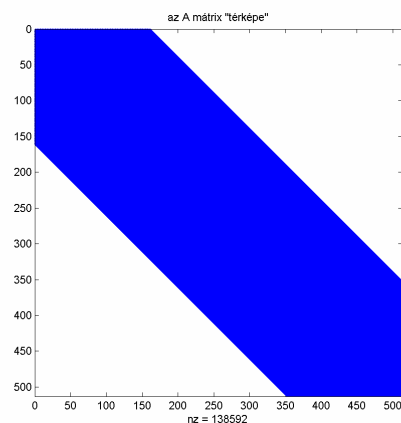


Mint látható az algoritmus egyes csúcokat pontosan szolgáltat, más – különösen az elfedett és kis intenzitású csúcokat – pontatlanul, és ez a pontatlanság csak nagyon lassan javul, ugyanez mondható el a nagyon rossz felbontó képességre vonatkozólag is.

## II.2.2. A KONJUGÁLT GRADIENS MÓDSZER JAVÍTÁSA PREKONDÍCIONÁLÁSSAL

A CG-módszer lassú konvergenciája annak köszönhető, hogy nagy az  $\mathbf{R}^* \mathbf{R}$  együtthatómátrix kondíciószáma. Ezt jelentősen csökkentettük regularizációval, de hangsúlyozzuk, hogy a regularizáció azért is elkerülhetetlen, mert a CG-algoritmus konvergenciájának az a feltétele, hogy a mátrix pozitív definit legyen. De abban az esetben ha a mátrixnak sok nulla eleme van, rendelkezésre áll egy további módszer a konvergencia gyorsítására. Ez a **prekondícionálás**, aminek alkalmazásával azt érjük el, hogy a kondíciósám még tovább csökken [18,52].

A módszer lényege a következő: Az  $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$  egyenlet együtthatómátrixát átalakítjuk egy  $\mathbf{D}$  mátrixszal úgy, hogy a  $\mathbf{D}^{-1} \mathbf{A}$  mátrix „közel legyen az identitásmátrixhoz”, azaz  $\mathbf{D}$  közel egyenlő  $\mathbf{A}$ -val, és ekkor az  $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$  egyenlet helyett a  $\mathbf{D}^{-1} \mathbf{Ax} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{y}$  egyenletet oldjuk meg. Ennek ugyanis az az előnye, hogy a  $\mathbf{D}^{-1} \mathbf{A}$  mátrixot rövid idő alatt és kevés számítással lehet invertálni, kevés tárhely kell hozzá és az identitásmátrixhoz közel eső mátrixnak a kondíciószáma is kicsi. Mivel esetünkben az  $\mathbf{A}$  szimmetrikus és viszonylag sok nulla eleme van ezt az ún. **inkomplett LU-felbontással** valósítjuk meg [18,37]. Ennek során az  $\mathbf{A}$  előállítását  $\mathbf{A} = \mathbf{LL}^* - \mathbf{Q}$ , azaz  $\mathbf{LL}^*$  majdnem az  $\mathbf{A}$  mátrixot adja. Ezt a MATLAB abban az esetben állítja elő, ha  $\mathbf{A}$  ún. **ritkamátrix**, tehát mint mondtuk, sok zérus eleme van. Ha az együtthatómátrixot ritkamátrixként definiáljuk, tárhelyet és időt takarítunk meg, mert a program a számításokat csak a nem nulla elemekkel végzi el, és csak azokat tárolja a memóriában. A II.14. ábrán az  $\mathbf{A}$  mátrix nem nulla elemeinek térképét láthatjuk.



II.14. ábra. Az  $\mathbf{A}$  mátrix nem nulla elemeinek elhelyezkedése

Az ábrán látható fehér tartomány a zérus értékek helye, a sötét sáv pedig az, ahol a nem nulla komponensek vannak. A vízszintes tengely alatt olvasható továbbá a zérustól különböző komponensek száma:  $n_z = 138592$ . Ez azt jelenti, hogy a zérustól különböző komponensek aránya 52,8%. Ez némileg kedvezőtlen, mert a tapasztalatok szerint a ritkamátrixok alkalmazásának hatása akkor szembetűnő, ha ez az arány kevesebb, mint 40%, viszont előnyös az, hogy a nem nulla komponensek a főátló körül csoportosulnak. Ugyanis ha nem így lenne, permutáló mátrixokkal ezt a helyzetet lenne célszerű elérni, mert a számítások mennyiségét így lehet a minimálisra szorítani. Bár a nem nulla elemek aránya nagyobb az ideálisnál, látjuk majd, hogy a CG-algoritmus konvergencia tulajdonságain – bár számottevően nem – némileg lehet javítani. Azért vizsgáltam meg a dolgozatomban mégis a kérdést, azért írtam le az algoritmust, mert előállhat olyan probléma, amelyre az arány kevesebb, mint 40% és akkor a módszer sokkal hatékonyabb, mint a fentiekben vizsgált esetben. (Ez a helyzet például akkor, ha nem térünk át a Gauss-féle normálegyenletre, hanem közvetlenül az  $\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  egyenletet oldanánk meg, mert az  $\mathbf{R}$  mátrix esetében ez az arány mindössze 28,9 %, mivel  $\mathbf{R}$ -nek „csak” 75952db nem zérus eleme van. Természetesen más problémák kapcsán is előállhat ez a helyzet.)

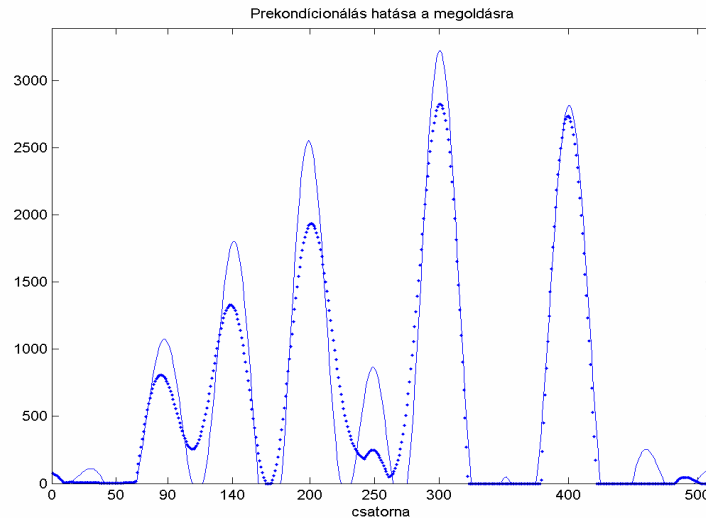
Módosítsuk most a II.2.1. pontbeli algoritmust a mondottaknak megfelelően. A keresett  $\mathbf{D}$  mátrix most éppen a felbontásban előálló  $\mathbf{L}$ , amelyet – ebben a szimmetrikus esetben – az alábbi módon használunk fel. Végezzük el az  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  egyenleten a következő azonos átalakításokat:

$$\mathbf{L}^{-1}\mathbf{A}(\mathbf{L}^*)^{-1}\mathbf{L}^*\mathbf{x} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{y} \quad (2.36)$$

Ekkor bevezetve az  $\mathbf{A1} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{A}(\mathbf{L}^*)^{-1}$ ;  $\mathbf{x1} = \mathbf{L}^*\mathbf{x}$  és  $\mathbf{y1} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{y}$  jelöléseket, világos, hogy mindössze annyit kell tenni, hogy az  $\mathbf{A1}\mathbf{x1} = \mathbf{y1}$  egyenletrendszeret oldjuk meg, ahol az  $\mathbf{A1}$  együtthatómátrix kondíciószáma kisebb, mint az  $\mathbf{A}$  mátrix ugyanezen adata. Számszerűsítve a mondottakat:  $\text{cond}(\mathbf{R}^*\mathbf{R}) = 1,85 \cdot 10^{18}$ ,  $\text{cond}(\mathbf{A}) = 2,43 \cdot 10^3$ , és végül  $\text{cond}(\mathbf{A1}) = 8,21 \cdot 10^2$ , tehát ezzel a módszerrel sikerült a kondíciószámot nagyjából még egy nagyságrenddel csökkenteni. Hangsúlyozzuk, hogy az  $\mathbf{A1}$  mátrix kiszámítása szükségtelen, az algoritmusban két segédvektort –  $\mathbf{e}$  és  $\mathbf{h} \in \mathfrak{R}^n$  – kell bevezetni, és ezekkel az algoritmus a következőképpen módosul:

$$\begin{aligned} & 1. \text{ kezdőérték: } \mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{y}; \mathbf{e}^{(0)} = (\mathbf{L}^*)^{-1}\mathbf{L}^{-1}\mathbf{r}^{(0)}; \mathbf{h}^{(0)} = -\mathbf{e}^{(0)}; \quad 2. \mathbf{e}^{(k)} = (\mathbf{L}^*)^{-1}\mathbf{L}^{-1}\mathbf{r}^{(k)}; \\ & 3. \mathbf{h}^{(k)} = (\mathbf{L}^*)^{-1}\mathbf{L}^{-1}\mathbf{v}^{(k)}; \quad 4. \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \lambda_k \mathbf{h}^{(k)}; \quad 5. \lambda_k = \frac{\langle \mathbf{e}^{(k)}, \mathbf{r}^{(k)} \rangle}{\langle \mathbf{A}\mathbf{h}^{(k)}, \mathbf{h}^{(k)} \rangle}; \quad 6. \mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{y}; \\ & 7. \mathbf{v}^{(k+1)} = -\mathbf{e}^{(k+1)} + \mu_k \mathbf{h}^{(k)}; \quad 8. \mu_k = \frac{\langle \mathbf{e}^{(k+1)}, \mathbf{r}^{(k+1)} \rangle}{\langle \mathbf{e}^{(k)}, \mathbf{r}^{(k)} \rangle}; \end{aligned}$$

A II.15. ábrán szemléltetjük a II.2.1. pontban leírt és a prekondicionált CG-algoritmus különbségét, 50 lépéses iteráció során kapott eredmények összehasonlításával.



**II.15. ábra. A prekondicionált (folytonos görbe) és a nem prekondicionált (pontvonal) CG algoritmus különbsége 50 lépés után**

Mint látható a prekondicionálás némileg javítja a konvergenciát, de a tapasztalat azt mutatja, hogy ez a módosítás – ennél az együtthatómátrixnál – nagyobb lépésszám esetén is csak elhanyagolható mértékben javít a megoldás tulajdonságain, a II.6. táblázat adatai csak csekély mértékben változnak.

### II.3. AZ AKTÍV HALMAZOK MÓDSZERE

Az aktív halmazok módszerét a II.29. kvadratikusan programozási feladatnál általánosabb

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{x}^* \mathbf{y}; \quad \Phi(\mathbf{x}) \rightarrow \min; \quad \text{feltéve, hogy} \quad ; \quad (2.37)$$

$$\mathbf{b}_j^{(1)} \mathbf{x} \geq \mathbf{c}_j^{(1)}, \quad j = 1, 2, \dots, J; \quad \mathbf{b}_k^{(2)} \mathbf{x} \leq \mathbf{c}_k^{(2)}, \quad k = 1, 2, \dots, K; \quad \mathbf{b}_m^{(3)} \mathbf{x} = \mathbf{c}_m^{(3)}, \quad m = 1, 2, \dots, M.$$

alakú feltételes szélsőérték feladatok megoldására fejlesztették ki [40,44,53,54]. Aktívnak nevezük azt a feltételt, amely egyenlőség formájában teljesül, és aktív halmaznak nevezük az összes olyan indexek halmazát, amelyekre a feltételek egyenlőség formájában teljesülnek. Jelölje az aktív halmazt  $\Theta$ . Definíció szerint tehát

$$\Theta = \{j | \mathbf{b}_j^{(1)} \mathbf{x} = \mathbf{c}_j^{(1)}\} \cup \{k | \mathbf{b}_k^{(2)} \mathbf{x} = \mathbf{c}_k^{(2)}\} \cup \{1, 2, \dots, M\} \quad (2.38)$$

A módszer lényege abban áll, hogy az egyes – általában iterációs – lépésekben olyan megoldást keresünk, amely az aktív halmaz által meghatározott indexű pontokban nem módosítja a megoldást olyan módon, hogy az adott közelítés kilépjen a megengedett megoldások  $\Omega$  halmazából. Azért „aktív” a halmaz, mert mint alább kiderül,  $\Theta$  minden iterációs ciklusban változik. Az aktív halmazok módszerének számos változata ismert. A következő pontokban két

eredményesen alkalmazható változatát mutatom be a módszernek. Az első esetben a konjugált gradiensek módszerével ötvözve, a második esetben pedig a szinguláris felbontással kombinálva adok használható dekonvolúciós algoritmust.

### II.3.1. AZ AKTÍV HALMAZ MÓDSZER ÉS A KONJUGÁLT GRADIENS MÓDSZER EGYÜTTES ALKALMAZÁSA

Kamatoztassuk, hogy a konjugált gradiens módszer gyorsan konvergál. Mint láttuk az előző pontban, önmagában a módszer nem jobb, mint a korábbiak, de ha ötvözzük az aktív halmazok módszerével akkor egy igen hatékony algoritmushoz jutunk [40,54]. Alkalmazzuk tehát, „nulladik” iterációs ciklusként, a konjugált gradiensek módszerét a szokásos  $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$  induló értékkel. Tegyük fel, hogy a  $k$ -adik iterációs lépésben a közelítő megoldást – átmenetileg –  $\xi^{(k)}$  jelöli. Ez az a megoldás, amelyre teljesül az  $\|\mathbf{A}\xi^{(k)} - \mathbf{y}\| < \varepsilon$  megállási kritérium, vagy amely  $L_0$  számú iterációs lépés után adódott. A gyakorlatban inkább az utóbbi logikát alkalmazzuk, mert a II.2.1. pont szerint ebben az iterációs ciklusban nem kapunk kielégítően pontos megoldást. Mivel ez tartalmazhat negatív komponenseket, először is képezzük ennek a közelítő megoldásnak az ortogonális projekcióját a megengedett megoldások  $\Omega$  halmazára. Az így kapott közelítő megoldás legyen az  $\mathbf{x}^{(k)}$ :

$$x_i^{(k)} = \begin{cases} 0; & i \in \mathfrak{S}, \text{ if } \xi_i^{(k)} \leq 0 \\ \xi_i^{(k)}; & \text{különben} \end{cases} \quad (2.39)$$

ahol  $\mathfrak{S}$  jelöli a összes indexek halmazát, azaz  $\mathfrak{S} = \{ 1, 2, \dots, n \}$ . Ha most a  $\|\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{y}\| < \varepsilon$  kritérium nem teljesül – a nulladik ciklus után a gyakorlatban általában ez a helyzet –, akkor pontosítjuk a megoldást a következő módon. Az  $\mathbf{x}^{(k)}$  közelítés és a pontos megoldás különbségét jelölje  $\delta\mathbf{x}$ , azaz  $\mathbf{A}(\mathbf{x}^{(k)} + \delta\mathbf{x}) = \mathbf{y}$  egzaktul teljesül. A  $k$ -adik közelítést úgy javítjuk, hogy meghatározzuk ennek a rendszernek egy  $\delta\mathbf{x}^{(k)}$  közelítő megoldását, tehát megoldjuk az  $\mathbf{A}\delta\mathbf{x} = \mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)} = -\mathbf{r}^{(k)}$  rendszert ugyancsak a konjugált gradiensek módszerével a  $\delta\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$  induló közelítéssel. Annak érdekében, hogy biztosítsuk a megoldás nem negatív voltát, felhasználjuk az aktív halmazok módszerének az alábbiak szerinti, általam jelentősen leegyszerűsített de – amint azt az eredmények igazolják –, még így is igen hatékony változatát.

A mi esetünkben a feltételek az  $x_i^{(k)} \geq 0; i \in \mathfrak{S}$  egyenlőtlenségek. Az  $i$ -edik feltétel tehát aktív, ha  $x_i^{(k)} = 0$ . Értelmezzük most az aktív halmazt,  $\Theta$ -t, az  $\mathfrak{S}$  indexhalmaz alábbi részhalmazaként:  $\Theta = \{i \in \mathfrak{S} \mid x_i = 0\} \subset \mathfrak{S}$ .

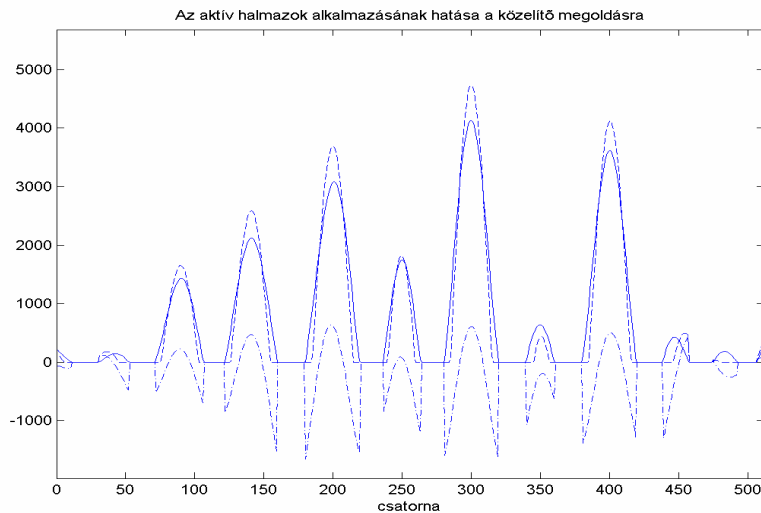
Az  $\mathbf{x}^{(k)}$  megoldás ismeretében kiszámítjuk az  $\mathbf{Ax}^{(k)} - \mathbf{y} = \mathbf{r}^{(k)}$  vektort. Itt kap szerepet elsőként az aktív halmaz. Ha  $i \in \Theta$  és  $r_i^{(k)} < 0$  akkor az  $i$  indexet töröljük az aktív halmazból, ami azt jelenti, hogy ha  $\mathbf{x}^{(k)}$  valamelyik komponense 0, akkor nem engedünk meg olyan változtatást, ami az adott komponenst negatívvá teszi, más szavakkal minden iterációs ciklusban csak megengedett megoldásokat fogadunk el. Megoldjuk tehát az  $\mathbf{A}\delta\mathbf{x} = -\mathbf{r}^{(k)}$  egyenletet de csak olyan megoldást fogadunk el, amelyre teljesül, hogy  $\delta x_i^{(k)} \geq 0$ ,  $i \in \Theta$ . Ennek érdekében megszerkesztünk egy mátrixot, jelölje ezt  $\mathbf{B}^{(k)}$ , amely a megoldásból csak azokat a komponenseket tartja meg, amelyek nem aktív feltételhez tartoznak.  $\mathbf{B}^{(k)}$ -t az  $\mathbf{E}$  identitásmátrixból kapjuk úgy, hogy az identitásmátrix  $e_{ii} = 1$  elemeit 0-ra módosítjuk, ha  $i \in \Theta$ . Ezek után megoldjuk az

$$\mathbf{AB}^{(k)} \mathbf{z} = -\mathbf{r}^{(k)} \quad (2.40)$$

egyenletrendszer. Cél, hogy a konjugált gradiensek módszerét alkalmazzuk, azonban ez közvetlenül nem működik, mivel  $\mathbf{AB}^{(k)}$  nyilvánvalóan nem pozitív definit, hiszen a  $\mathbf{B}^{(k)}$  mátrixnak mindazon oszlopa zérus vektor, amelynek indexe eleme az aktív halmaznak. Ezért a  $\mathbf{B}^{(k)}$  mátrixból elhagyjuk az összes ilyen oszlopot, így kapjuk  $\mathbf{C}^{(k)}$ -t. Ha  $|\Theta| = p$ , azaz  $p$  db aktív feltétel van az aktuális iterációs lépésben, akkor  $q = n - p$  jelöléssel nyilván teljesül, hogy  $\mathbf{C}^{(k)} \in \mathfrak{R}^{n \times q}$ . A megoldásnak tehát azt a  $q$  db koordinátáját módosítjuk, amelyek nem zérus. Tehát (2.40) helyett megoldjuk a

$$\mathbf{C}^{(k)*} \mathbf{AC}^{(k)} \mathbf{z} = -\mathbf{C}^{(k)*} \mathbf{r}^{(k)} \quad (2.41)$$

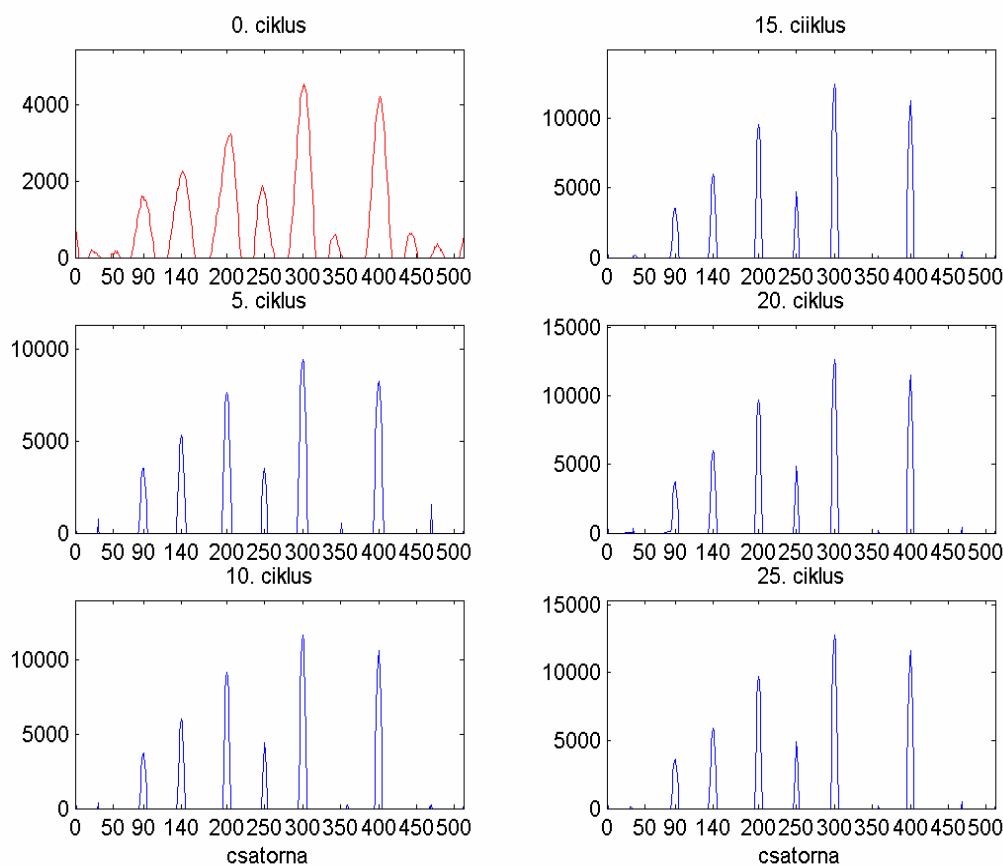
egyenletrendszer, ahol  $\mathbf{C}^{(k)*} \mathbf{AC}^{(k)} \in \mathfrak{R}^{q \times q}$  kvadratikus, pozitív definit mátrix,  $\mathbf{z}^{(0)} = \mathbf{0} \in \mathfrak{R}^q$  kezdőértékkel. Itt is előírhatunk  $L_1$  lépésszámot, vagy alkalmazzuk az  $\|\mathbf{AB}^{(k)} \mathbf{z}^{(j)} + \mathbf{r}^{(k)}\| < \varepsilon$  megállási kritériumot. Ezek után a korrekció a  $\delta\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{C}^{(k)} \mathbf{z}^{(j)}$  definícióval adódik, tehát a  $(k+1)$ -edik lépésben a közelítő megoldás az  $\boldsymbol{\xi}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \delta\mathbf{x}^{(k)}$  vektor. Ennek szintén képezzük az ortogonális projekcióját az  $\Omega$  halmazra, definíció szerint ez az  $\mathbf{x}^{(k+1)}$  közelítő megoldás. Mint látható, ez az algoritmus két egymásba ágyazott iterációból áll, a „belső” iteráció a konjugált gradiensek módszere, a „külső” pedig az aktív halmazok módszere. Ha teljesül a  $\|\mathbf{Ax}^{(k+1)} - \mathbf{y}\| < \varepsilon$  kritérium, megkaptuk a kívánt pontosságú megoldást, ha nem, akkor ismételjük a fenti egymásba ágyazott iterációs ciklusokat. A „nulladik” ciklust természetesen csak egyszer, induló lépésként futtatjuk le. Mielőtt az egymásba ágyazott algoritmusokat dekonvolúcióra alkalmaznánk, érdemes szemléletessé tenni az aktív halmazok szerepét a megoldás javításában.



**II.16. ábra. Az aktív halmazok hatása a megoldás javítására**

A II.16. ábrán egyrészt látható egy folytonos görbe, mely a konjugált gradiensek algoritmusának majd egy ortogonális projekciónak az eredményét mutatja egy 100 lépéses iterációt követően,  $\alpha = 10^{-5}$  regularizációs paraméter mellett. Az adott példában  $\|Ax^{(k)} - y\| = 3,7170 \cdot 10^3$ . Ezután az aktív halmazok módszerét alkalmaztuk a korrekció kiszámítására ugyancsak 100 lépésben. Ennek eredménye, tehát az előző közelítő megoldás korrekciója, a pontozott vonallal ábrázolt megoldás. Látható, hogy ahol az előző közelítés zérus, ott a korrekció is zérus, bár hangsúlyozzuk, hogy pozitív korrekció lehetséges ezeken a helyeken, csak negatív értelmű korrekció nem. Majd a közelítő megoldást és a korrekciót összeadtuk és képeztük a projekciót. Ezt ábrázolja a szaggatott vonal. Érdeemes kiemelni, hogy  $\|Ax^{(k)} - y\| = 7,4421$ , tehát a hiba egyetlen „javító” ciklusban 3 nagyságrenddel csökkent. Mint látható, végeredményben a valódi csúcsok szűkebbek és magasabbak lettek, a hamis csúcsokat az algoritmus pedig kezdi eltüntetni.

Alkalmazzuk ezt az algoritmust dekonvolúcióra  $\alpha = 10^{-6}$  regularizációs paraméterrel az alábbi módon. A nulladik iteráció 150 lépésből áll. Ezután 25 külső iterációs ciklusban alkalmazzuk az aktív halmazok módszerét, a belső iteráció – a konjugált gradiens módszer –, minden ciklusban mindössze 20 lépéses. A számítások elvégzéséhez mindössze 2,4s időtartamra van szükség, és az adott lépésszám esetén az  $\|Ax^{(k)} - y\|$  eltérés normája mindössze 2,21. A II.17. ábrán látható a számításoknak, a nulladik ciklusnak és az utánuk következő javító ciklusok közül minden ötödiknek az eredménye. Mint az jól látható az aktív halmazok módszere jelentős mértékben javít a megoldáson, már az ötödik ciklusban is szemmel láthatóan jelentősen csökkent a szórás, tehát javult a felbontás, csaknem teljesen eltűntek a hamis csúcsok. A következő ciklusokban a szórás – ez már szemmel alig látható, de a számítások igazolják – ciklusról ciklusra csökken és a hamis csúcsok is egyre kisebb intenzitásúak.



**II.17. ábra.** Az aktív halmazok módszerének és a konjugált gradiensek módszerének az együttes alkalmazása. A nulladik ciklus kizárólag a konjugált gradiens módszer alkalmazása, utána a megoldás javítása az aktív halmazok módszerével történik

További előnye az algoritmusnak, hogy kevésbé érzékeny az  $\alpha$  regularizációs paraméterre. A tapasztalat szerint tetszőleges  $\alpha \leq 10^{-5}$  alkalmazása esetén alig tapasztalható különbség a megoldásokban.

Sorszám	Egzakt pozíció	Számított pozíció	Abszolút eltérés	Szórás	Félérték szélesség
1.	90	89,76	-0,24	1,43	3,37
2.	140	139,76	-0,24	1,41	3,34
3.	200	200,00	0,00	1,43	3,37
4.	250	249,97	-0,03	1,60	3,77
5.	300	300,00	0,00	1,42	3,34
6.	400	400,00	0,00	1,42	3,34

**II.7. táblázat.** Az aktív halmazok módszerével kapott megoldás a 25. ciklusban

A II.7. táblázatban feltüntettem a 25. ciklus után kapott megoldás adatait. Mivel megoldásként egész számokat, a csatornák pozícióját várjuk, ha kerekítjük a számított pozíciókat, látható, hogy az egzakt értékeket kapjuk megoldásként. A szórás és ezzel együtt a félérték szélesség is jelentősen jobb, mint a korábbi módszerek alkalmazása esetén. Például a Gauss-Seidel

iterációhoz képest a felbontás egy nagyságrenddel jobb. Definíció szerint tehát – tekintettel arra, hogy jelen számítás egy 512 csatornás analizátorra vonatkozik –, ez az eredmény azt jelenti, hogy 4 csatornányi távolságra levő, tehát  $\approx 15\text{-}20$  keV energiakülönbségű fotocsúcsokat ezzel a módszerrel már el tudunk különíteni.

### **II.3.2. AZ AKTÍV HALMAZOK MÓDSZERÉNEK EGY PONTOSABB VÁLTOZATA, MÁTRIXOK SZINGULÁRIS FELBONTÁSÁNAK ALKALMAZÁSA**

Szeretnék rávilágítani az előző pontban tárgyalt módszer egy esetleges hibájára. Az aktív halmaz minden ciklusban elvileg bővíthet is és szűkülhet is. Az előző pontban – és általában, a dolgozatban vizsgált problémakörben – cél az, hogy a hamis csúcsok eltűnjenek a spektrumból és elvárjuk, hogy egy újabb ciklusban már ne is jelenjenek meg csúcsok olyan helyen, ahol nincs csúcs, illetve ott, ahol az előző ciklusban kapott megoldásban nem volt csúcs. A II.3.1. pontban ilyen hibás megoldásokat nem kaptunk, a hamis csúcsok eltűntek, de tisztában kell lennünk vele, hogy a lehetőség megvan arra, hogy azokon a helyeken, ahol egy adott megoldás a nulla értéket vette fel a következő iterációban ez az érték pozitívvá váljon. Az előző pontban, amikor az aktív halmazok módszerét a konjugált gradiensek módszerével ötvöztük – tekintettel az algoritmus egyszerűségére –, ezt a változást nem irányítottuk, csak annak lehetőségét zártuk ki, hogy a nulla megoldás negatívvá váljon. Ebben a pontban ezt a fogyatékosítást javítjuk, megvizsgáljuk a pozitív irányú változás lehetőségét, és irányítjuk az ilyen értelmű változásokat. Ezen kívül végrehajtottunk még egy módosítást. Az egyes ciklusokban, amit az aktív halmazok javított módszere vezérel, nem a konjugált gradiensek módszerét alkalmazzuk, hanem mátrixok szinguláris felbontását. Az I.6. pontban megmutattuk, hogy a szinguláris felbontás közvetlenül nem alkalmas az egyenletrendszer direkt megoldására, de amint az ebben a pontban kiderül, iterációs környezetben igen eredményesen alkalmazható ez a fogalom.

Ismét a (2.28) függvény szélsőértékét keressük abban az esetben, amikor  $\mathbf{Q} = \mathbf{E}$  az identitásmátrix. A megoldásoktól az eddigiekben csak egy feltételt követeltünk meg, azt hogy  $x^{(k)}(i) \geq 0$  teljesüljön  $i = 1, 2, \dots, n$  esetén. Tekintettel arra, hogy egy szélsőérték feladat megoldását keressük, az optimális megoldásra vonatkozólag előírjuk még a következő feltételeket:

1. Minden olyan helyen ahol  $x^{(\text{opt})}(i) > 0$  teljesül elvárjuk, hogy  $\frac{\partial \Phi}{\partial x^{(\text{opt})}} = 0$  legyen; és
2. Minden olyan helyen ahol  $x^{(\text{opt})}(i) = 0$  teljesül – tehát az aktív halmaz által meghatározott koordinátáknál –, elvárjuk, hogy  $\frac{\partial \Phi}{\partial x^{(\text{opt})}} \geq 0$  legyen.



Ezt nyilván csak az elméletileg egzakt optimális megoldástól várjuk el, amit természetesen előállítani nem tudunk. Azonban – különösen a 2. feltétel, hiszen az 1. feltétel nyilvánvaló – irányt mutat a pontosabb megoldás előállítására. Ennek tartalma ugyanis az, hogy ha egy adott helyen a megoldás zérus, akkor a megoldás ezen a helyen csak olyan módon változhat meg, hogy a  $\Phi(\mathbf{x})$  függvény értéke növekedjék. Ha ugyanis tovább csökkenhetne, akkor nem lenne  $\mathbf{x}^{(\text{opt})}$  a minimum feladat optimális megoldása. A derivált kiszámítása egy adott közelítő  $\mathbf{x}^{(k)}$  megoldásra nem jelent problémát, hiszen a deriváltat a (2.29) formula megadja.

Az aktív halmazok módszerét a következőképpen módosítottam:

**1. módosítás:** A  $k$ -adik iterációs lépésben az aktív halmaz által meghatározott pontokban kiszámítjuk a  $\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{x}^{(k)}}$  derivált értékét. Megkeressük azokat a koordinátá(ka)t, amely(ek)re ez(ek) abszolút értékben a legnagyobb(ak), majd ez(eke)t az index(ek)et töröljük az aktív halmazból, vagyis megengedjük, hogy ezeken a helyeken a megoldás ismét pozitív legyen és ezzel közelebb kerüljünk az optimumhoz.

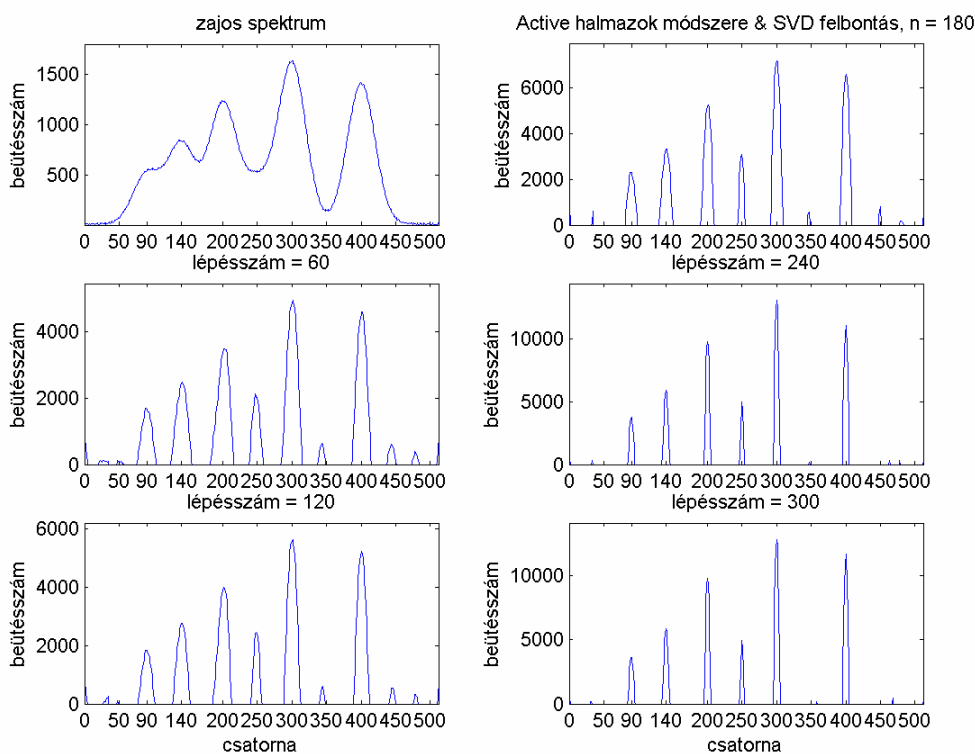
**2. módosítás:** Még egy ponton precízebbé tesszük az algoritmust. A módosítás erőteljesen hasonlít a relaxációnál alkalmazott gondolatmenetre. Az eddigiekben egy adott iterációs lépés eredményének egész egyszerűen képeztük az ortogonális projekcióját a megengedett megoldások halmazára, ezt tekintettük újabb közelítő megoldásnak. Most – a II.3.1. pont jelöléseivel összhangban –, ha  $\mathbf{x}^{(k)}$  jelöli a  $k$ -adik lépésben a nem negatív megoldást, és a következő iteráció az  $\xi^{(k+1)}$  megoldást szolgáltatja – ami nem feltétlenül nem negatív –, akkor az  $\mathbf{x}^{(k+1)}$  megoldást az alábbi módon definiáljuk:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \gamma_k (\xi^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}) \quad (2.42)$$

ahol  $\gamma_k \in ]0, 1]$  az a legnagyobb valós szám, amelyre  $\mathbf{x}^{(k+1)}$  nem negatív. Ha  $\gamma_k = 1$ , az azt jelenti, hogy  $\xi^{(k+1)}$  eleve nem negatív megoldás volt, ha azonban  $\gamma_k < 1$  akkor egy vagy több helyen az új megoldás 0-vá válik, tehát az aktív halmaz elemszáma növekszik.

Az algoritmus a mondottak tükrében a következő: lényegében megtartjuk a II.3.1. pontban leírt eljárás logikáját tehát a nulladik lépésben ugyancsak az  $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$  egyenletrendszeret oldjuk meg, de most nem a konjugált gradiensek módszerével, hanem SVD-felbontással [18-20]. Ezek után ugyancsak a (2.40) rendszer megoldása következik folytonosan változó jobboldallal, de egyrészt beillesztjük az algoritmusba a I. és II. módosításokat valamint a (2.40) egyenlet megoldását minden iterációs lépésben ugyancsak szinguláris felbontással számoljuk. Ennek egyrészt az a következménye, hogy csak egy iteráció van, az aktív halmazok iterációja – tehát nincs „külső” és „belső” iteráció –, a megoldások minden iteráción belül egy lépésben adódnak, másrészt hangsúlyozzuk, hogy elvileg nem szükséges áttérni a (2.41) egyenletrendszerre, mert a

szinguláris felbontás akkor is elvégezhető, ha a mátrix indefinit és az sem szükséges, hogy kvadratikus legyen. Azonban időt takarítunk meg, ha mégis a (2.41) rendszert oldjuk meg minden lépésben, ugyanis világos, hogy a  $\mathbf{C}^{(k)*}\mathbf{AC}^{(k)}$  mátrixnak az  $\mathbf{AB}^{(k)}$  mátrixhoz képest annyival kevesebb sora van, ahány eleme van az aktív halmaznak, így különösen az iteráció vége felé a számítások mennyisége jelentősen csökken, hiszen egy kisebb méretű mátrix szinguláris felbontása jelentősen kevesebb számolást igényel, tekintettel arra, hogy a számítások mennyisége  $n^3$ -bel arányos. Egy hátránya azonban van annak a módosításnak, hogy a szinguláris felbontást alkalmazzuk. Mégpeidg az, hogy az algoritmus számolás és időigényesebb, ugyanis (2.41) szerint az  $\mathbf{C}^{(k)*}\mathbf{AC}^{(k)}$  szinguláris felbontását minden egyes iterációs lépésben ki kell számolni. Mivel pedig  $\mathbf{C}^{(k)}$  függ az aktív halmaztól, ami természetéből adódóan ciklusról-ciklusra változik, az invertálandó mátrix is változik. Alkalmazzuk ezt az algoritmust is a szokott rendszer megoldására.



**II.18. ábra. Az aktív halmazok módszerének alkalmazása.  
A megoldást minden iterációs lépésben SVD-felbontással számítottuk**

A II.18. ábrán látható egy 300 lépéses iteráció eredménye, néhány közbülső megoldás szemléltetésével. A regularizációs paraméter értéke ugyancsak  $\alpha = 10^{-6}$ , az eltérés normája:  $\|\mathbf{Ax}^{(k)} - \mathbf{y}\| = 2,16$ , tehát ugyanaz a nagyságrend, mint a II.3.1. pontban, a számítások időtartama 75,4s. Ha ezt az ábrát összevetjük a II.17. ábrával, szembetűnik a lassabb, de „szisztematikusabb” konvergencia. A hamis csúcsok lassan, fokozatosan de biztosan eltűnnek, miközben a valódi csúcsok egyre élesebbek lesznek.

Sorszám	Egzakt pozíció	Számított pozíció	Abszolút eltérés	Szórás	Féltérték szélesség
1.	90	89,98	-0,02	1,40	3,32
2.	140	139,98	-0,02	1,39	3,28
3.	200	200,00	0,00	1,43	3,36
4.	250	249,80	-0,2	1,69	3,98
5.	300	300,00	0,00	1,42	3,34
6.	400	400,00	0,00	1,42	3,34

II.8. táblázat. Az aktív halmazok és az SVD-felbontás módszerével kapott megoldás 300 lépés után

Kétségtelen hátránya ennek az algoritmusnak az időtényező, ámbar a problémakört tekintetbe véve, nagyságrendileg egy perc számítási idő semmiféle problémát nem okozhat. Ez az ára a stabilabb megoldásnak. Végül hasonlítsuk össze a II.3.1. pontban és ebben a pontban kapott megoldásokat kvantitatív módon is. Az adatokat a II.7. táblázat tartalmazza.

A két táblázat adatait összehasonlítva elmondhatjuk, hogy gyakorlatilag ugyanolyan pontosságú megoldásokat kapunk. Lényegében ugyanazokat a pozíciókat olvassuk ki ebből a táblázatból is, és ugyanazt az energia felbontást kapjuk. Az ok, amiért ezt az algoritmust is kidolgoztam egyrészt az volt, hogy a gyakorlatban is eredményesen lehessen alkalmazni az elméletileg nagy jelentőségű szinguláris felbontás fogalmát, mert ez a szakirodalomból az adott probléma kapcsán teljesen hiányzik. Másrészt pedig azért, mert – mint a bevezetőben jeleztem –, a dolgozatomban **egy adott fizikai problémának** keresem a megoldását matematikai módszerekkel, de semmi sem garantálja azt, hogy egy más probléma, egy más szerkezetű rosszul kondicionált mátrix esetén is működik mindkét módszer.

#### II.4. DEKONVOLÚCIÓ „SÚLYOZOTT REGULARIZÁCIÓVAL”

Ebben a pontban, még egyszer utoljára, kitérek a Gauss-féle normálegyenletek egy újabb megoldási lehetőségére. Már több algoritmust is leírtam, amelyek igen hatékonyan működnek, azonban a most következő algoritmus, amelyet én „súlyozott regularizáció”-nak neveztem el, nagyon egyszerű szerkezetű, egyszerűen kódolható, mindemellett nagyon jó a felbontása és érzéketlen a regularizációs paraméterre.

A következő két pontban ugyanazt az algoritmust írom le két kódolási lehetőséget kínálva. A különbség az, hogy az iterációhoz szükséges mátrix invertálását két elvileg különböző módon végzem el. A II.4.1. pontban a kódolásnál erősen hagyatkozom a MATLAB-ra, mert az LU-felbontást alkalmazom, ez pedig beépített függvény, egyetlen utasítással hívható. Arra való tekintettel azonban, hogy az algoritmus MATLAB-tól független környezetben is egyszerűen kódolható legyen, adok egy másik megoldást is az inverz meghatározására a II.4.2. pontban,

olyan módszer alkalmazásával, amelyet a dolgozatomban eddig nem alkalmaztam, ez pedig a lineáris algebra igen közismert és hatékony eszköze a Gram-Schmidt ortogonalizáció. Mint látni fogjuk, ez utóbbinak a kódolása igen egyszerűen végrehajtható.

A „súlyozott regularizáció” alap gondolata a következő. Mivel a Gauss féle normálegyenletben megjelenő  $\mathbf{R}^* \mathbf{R}$  mátrix nem pozitív definit, az eddigiekben úgy tettük pozitív definitté és egyúttal regulárisrá, hogy az  $\mathbf{R}^* \mathbf{R}$  helyett együtthatómátrixként az  $\mathbf{A} = \mathbf{R}^* \mathbf{R} + \alpha \mathbf{Q}$  mátrixot választottuk, ahol  $\mathbf{Q}$  a regularizációs mátrix és  $\alpha \in \Re$  a regularizációs paraméter. Ezután pedig minden egyes iterációs lépésben ugyanezzel az  $\mathbf{A}$  mátrixszal számoltunk. Az előző fejezetekben mindenütt a  $\mathbf{Q} = \mathbf{E}$  választással éltünk, ahol  $\mathbf{E}$  az identitásmátrix. Az alábbiakban ezen változtatunk úgy, hogy induló lépésben  $\mathbf{Q} = \mathbf{E}$ , de ezután minden egyes iterációs lépésben a  $\mathbf{Q}$  főátlóbeli komponensei közül néhányat megváltoztatunk.

Tekintetbe véve azt, hogy megoldásként nem negatív valós számokat várunk, ezúttal az indefinit megoldás  $\Omega$ -ra vonatkozó projekciója helyett a következőt tesszük. Úgy „korlátozzuk” a negatív megoldások előfordulását és ezek nagyságát, hogy minden egyes iterációs lépésben kikeressük az adott  $\mathbf{x}^{(k)}$  közelítő megoldás negatív komponenseit, és azon  $i \in \mathfrak{I}$  indexekre, amelyekre  $x_i^{(k)} < 0$  a  $\mathbf{Q}$  mátrix  $e_{ii} = 1$  komponenseit megváltoztatjuk  $\beta$ -szorosra ( $\beta = 10, 100, 1000, \dots$ ) stb., tehát megnöveljük 1, 2, 3, ...stb. nagyságrenddel. A pozitív komponensek esetében pedig a főátló eleme változatlanul 1 marad. Ennek az a következménye, hogy a regularizáció a negatív komponensekre fokozott hatással van, azokat – elvileg nem de – gyakorlatilag eltünteti. Mint alább kiderül, ha például  $\beta = 1000$ , és a pozitív komponensek nagyságrendje  $10^4$ - $10^5$ , akkor a negatív komponensek abszolút értékben 1 nagyságrendűek.

Az iteráció szerkezete is sokkal egyszerűbbnek választható. Az eddigiekben megszokott  $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{R}^* \mathbf{y} - \mathbf{A} \mathbf{x}^{(k)})$  alakú iteráció helyett a következő séma alkalmazható: Induló értéknek választjuk a méréssel kapott  $\mathbf{y}^{(0)} = \mathbf{y}$  spektrumot. Ennek birtokában meghatározzuk az  $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{R}^* \mathbf{y}^{(0)}$  rendszer megoldását, a nulladik közelítő megoldást. (Az inverz kiszámítása kétféle módon történik majd a II.4.1. és II.4.2. pontokban.) Ezt a közelítést jelöli  $\mathbf{x}^{(0)}$  és ekkor definíció szerint az  $\mathbf{y}^{(1)} = \mathbf{R}^* \mathbf{x}^{(0)}$  vektor a következő iterációs lépésben a „dekonvolvándó spektrum”. Általában ha  $\mathbf{y}^{(k)}$  ismert, akkor az  $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{R}^* \mathbf{y}^{(k)}$  rendszer megoldása definíció szerint az  $\mathbf{x}^{(k)}$  közelítés és ekkor  $\mathbf{y}^{(k+1)} = \mathbf{R}^* \mathbf{x}^{(k)}$  a következő lépés kezdőértéke.

A módszer előnye, hogy sokkal kevésbé érzékeny az  $\alpha$  regularizációs paraméterre, és az aktív halmazok módszerével kapott megoldásával összemérhető a felbontása. Egyetlen hátránya, hogy mivel minden iterációs lépésben változik az  $\mathbf{A} = \mathbf{R}^* \mathbf{R} + \alpha \mathbf{Q}$  együtthatómátrix, minden lépésben el kell végezni a felbontását, ki kell számítani az inverzeket, ami időigényes.

## II.4.1. SÚLYOZOTT REGULARIZÁCIÓ CHOLESKY-FELBONTÁSSAL

Oldjuk meg tehát az  $\mathbf{Ax} = \mathbf{R}^* \mathbf{y}$ ;  $\mathbf{A} = \mathbf{R}^* \mathbf{R} + \alpha \mathbf{Q}$ ;  $\mathbf{Q} = [q_{ij}]$ ; egyenletrendszer  $\mathbf{y}^{(0)} = \mathbf{y}$ , kezdőértékkel  $\mathbf{Q}^{(0)} = \mathbf{E}$  induló regularizációs mátrix alkalmazásával az

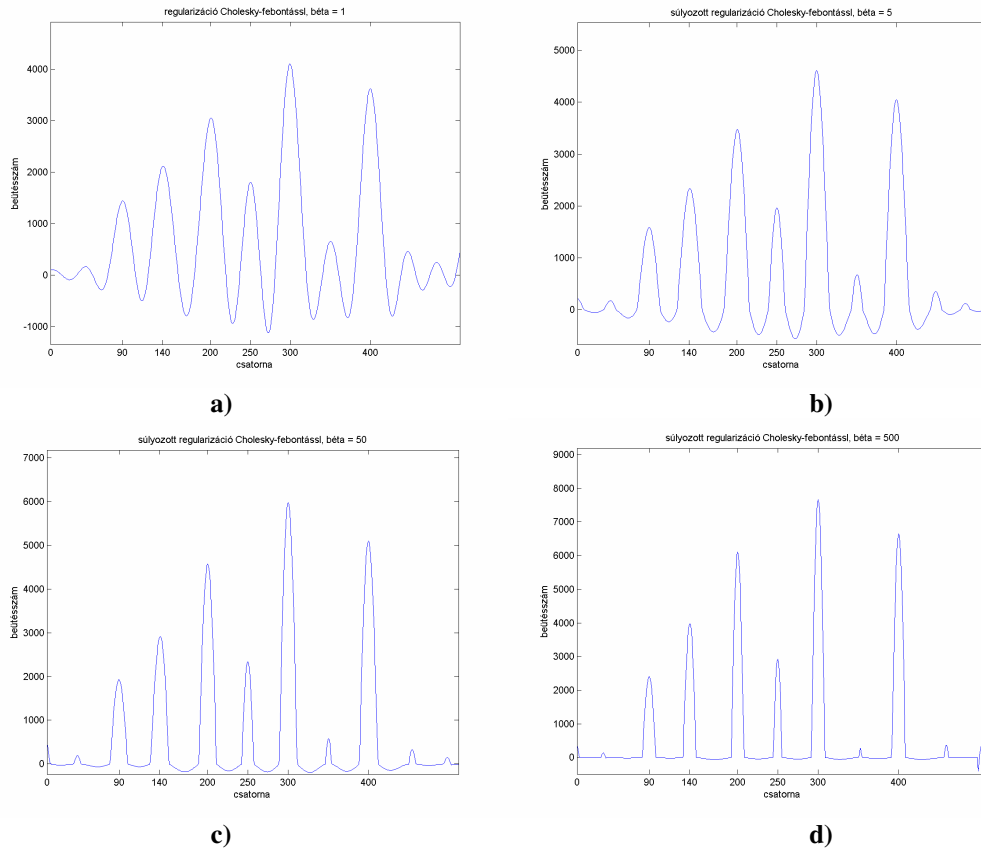
$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{R}^* \mathbf{y}^{(k)}; \mathbf{y}^{(k+1)} = \mathbf{R}^* \mathbf{x}^{(k)}; q_{ii}^{(k)} = \begin{cases} 1; & \text{ha } x_i^{(k)} \geq 0; \\ \beta; & \text{ha } x_i^{(k)} < 0; \end{cases} \quad (2.42)$$

iterációs séma szerint,  $\beta > 1$  esetén. Mint a gyakorlatban kiderül,  $\beta = 100, 1000, \dots$  értékek esetén van számottevő hatása az eljárásnak. Egyetlen kérdés merül fel, hogy az  $\mathbf{A}$  mátrix inverzét milyen módszerrel számítjuk ki. A hagyományos inverz alkalmazásával nem megyünk semmire, a megoldás erősen oszcilláló. A szinguláris felbontás elvileg jó, de gyakorlatilag nem megfelelő, ugyanis minden iterációs lépésben el kell végezni a mátrix felbontását, ami nagyon sok számítással jár, így jelentős mértékben megnő az algoritmus időtartama, ami nem kívánatos.

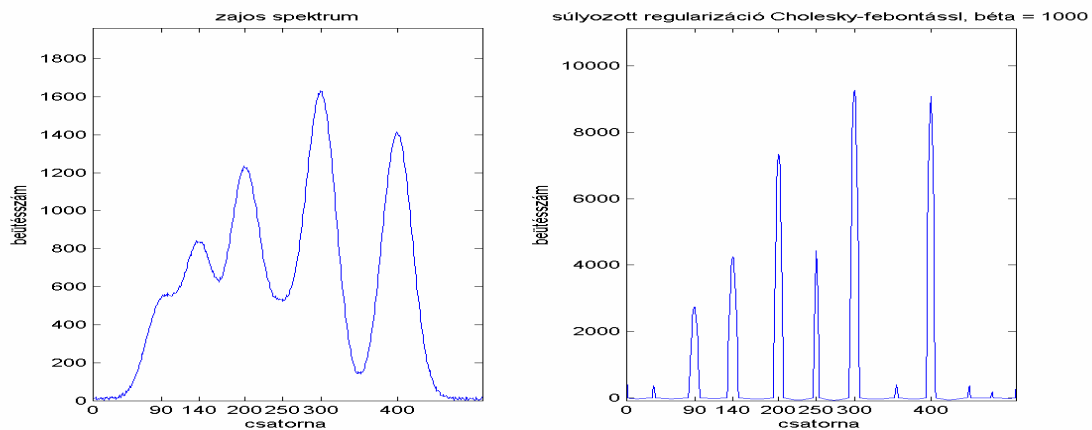
Ehelyett vegyük tekintetbe, hogy az  $\mathbf{A}$  mátrix szimmetrikus és pozitív definit. Ekkor felbontható  $\mathbf{A} = \mathbf{LL}^*$  alakban, ahol  $\mathbf{L}$  alsó háromszög mátrix. Ezt az előállítást **Cholesky-felbontásnak** nevezzük [15,16,18]. A módszer előnye, hogy egy alsó, illetve felső háromszögmátrix invertálása nagyon egyszerűen, nagy  $n$  esetén sokkal kevesebb számítással elvégezhető, mint egy olyan négyzetes mátrix esetében ahol a főátló mindkét oldalán vannak 0-tól különböző komponensek.

Az  $\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{R}^* \mathbf{y}^{(k)}$  rendszert két lépésben oldjuk meg. Először a  $\mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{R}^* \mathbf{y}^{(k)}$  közbülső értéket számítjuk ki, majd ennek ismeretében az  $\mathbf{x}^{(k)} = (\mathbf{L}^*)^{-1} \mathbf{z}^{(k)}$  közelítő megoldást. Tehát a négyzetes  $\mathbf{A}$  mátrix invertálása helyett 2db háromszögmátrixot invertálunk. Ez azt jelenti, hogy az inverz mátrix kiszámításához szükséges  $n^3$  műveletigény  $n^3/6$ -ra, tehát a hatodára csökken. A (2.42) iteráció többi lépése világos és egyértelmű.

Alkalmazzuk tehát a (2.42) „súlyozott regularizációs algoritmust” Cholesky-felbontással,  $\alpha = 10^{-6}$  regularizációs paraméterrel, különböző  $\beta$  súlyok mellett. Az eredmények a II.19. a), b), c) és d) ábrán láthatók, ahol  $\beta$  értéke rendre 1, 5, 50, 500. Az ábrán egyelőre kizárólag a súlyozás negatív komponensekre kifejtett hatását szeretnénk szemléltetni. Az iteráció mindössze 10 lépésből állt és a számítások időtartama 2,6s volt. Hasonló módon vizsgálható az  $\alpha$  regularizációs paraméter változtatásának hatása a megoldásra. A következő pontban kitérünk erre is. A tapasztalat szerint a csúcsok annál élesebbek, minél kisebb  $\alpha$  értéke, ahogyan az el is várható. Nagyon lényeges azonban, amint már hangsúlyoztam is, hogy ez az algoritmus és a II.4.2. pontban tárgyalt algoritmus is gyakorlatilag érzéketlen a regularizációs paraméterre, tetszőleges  $\alpha$  esetén az algoritmus konvergens.



**II.19. ábra.** A súlyozás hatása a regularizációra. A negatív komponensek fokozatosan eltűnnek a megoldásból. A  $\beta$  súlyfaktor értéke az a), b), c) és d) ábrákon rendre  $\beta = 1, 5, 50$  és  $500$ .



**II.20. ábra.** Dekonvolúció súlyozott regularizációval, Cholesky-febontással

A pont lezárásaképpen alkalmazzuk a fenti algoritmust a zajos spektrumra  $\alpha = 10^{-9}$  és  $\beta = 1000$  paraméterek mellett  $L = 100$  lépéses iterációban. A számítások időtartama 25,3s. A II.20. ábrán látható az eredmény. Az ábrán látható megoldás adatait a II.9. táblázatban foglaltam össze. A pozíciókat egy kivétellel egzaktul kapjuk, a felbontóképesség pedig ugyanaz a kiváló érték amit az aktív halmazok módszere is szolgáltatott. Ezt gyakorlatilag tovább fokozni már nem lehet, hiszen a 3 egységnyi fél-érték szélesség azt jelenti, hogy a módszer elkülönít olyan csúcsokat amelyek között mindössze 1-2 csatorna van. Tehát ebben a kérdésben a detektor csatornaszáma adja az alsó korlátot.

Sorszám	Egzakt pozíció	Számított pozíció	Abszolút eltérés	Szórás	Félték szélesség
1.	90	89,36	-0,64	1,43	3,37
2.	140	140,00	0,00	1,44	3,40
3.	200	200,00	0,00	1,37	3,23
4.	250	249,99	-0,01	1,58	3,73
5.	300	300,00	0,00	1,36	3,21
6.	400	400,26	0,26	1,37	3,22

II.9. táblázat. Súlyozott regularizáció módszerével kapott megoldás 100 iterációs lépés után, Cholesky-felbontás alkalmazásával

## II.4.2. KONDÍCIÓSZÁM CSÖKKENTÉS GRAM-SCHMIDT ORTOGONALIZÁCIÓVAL

Az egyenletrendszer megoldása során mindenképpen szükséges egy mátrix inverzét számítani, iterációs ciklusonként. A közvetlen invertálás a nagy kondíciószám miatt nem működik jól, meg kell kerülni különböző módszerekkel. Erre szolgált az elméletileg és gyakorlatilag is igen fontos fogalom, a szinguláris felbontás, amit azonban a nagy számításigény miatt célszerű elkerülni és ugyanezt célozta az előző pontban – és ha nem is hangsúlyoztuk mindenütt, a korábbiakban is számos pontban alkalmazott – LU- illetve Cholesky-felbontás. Mindezen átalakítások célja, hogy az invertálandó mátrixot úgy faktorizáljuk, hogy az egyes faktorok kondíciószáma sokkal kisebb legyen és az egyes tényezők inverzét kevesebb számítással, kisebb hibával ki lehessen kiszámítani.

A most tárgyalandó eljárás is ezt célozza. Induljunk ki abból, hogy az  $\mathbf{A} = \mathbf{R}^* \mathbf{R} + \alpha \mathbf{Q}$ ;  $\mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$  együtthatómátrix tetszőleges pozitív  $\alpha \in \mathfrak{R}$  esetén reguláris, ami más szavakkal azt jelenti, hogy oszlopvektorai lineárisan függetlenek.  $\mathbf{A}$ -nak van tehát  $n$  db,  $n$ -komponensű, lineárisan független oszlopvektora. Jelölje az  $\mathbf{A}$  mátrix oszlopvektorait  $\mathbf{a}_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Ebből a vektorrendszerből a **Gram-Schmidt-féle ortogonalizációs** eljárással [10,12,14] előállíthatunk egy olyan  $\mathbf{b}_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$  vektorrendszert, melynek vektorai páronként ortogonálisak, azaz tetszőleges  $(i, j)$  indexpárra teljesül, hogy  $\langle \mathbf{b}_i ; \mathbf{b}_j \rangle = 0$  ha  $i \neq j$ , és természetesen  $\langle \mathbf{b}_j , \mathbf{b}_j \rangle = \|\mathbf{b}_j\|^2 \neq 0$ , hiszen lineárisan független rendszerben nem lehet null-vektor. (Hangsúlyozzuk, hogy nem szükséges ortonormált rendszert előállítani az  $\mathbf{A}$  oszlopaiból, azaz nem szükséges, hogy a  $\mathbf{b}_j$  vektorok egységnyi hosszúságúak legyenek. Mint látni fogjuk, a módszer működik ezen kitétel nélkül is.) A  $\mathbf{b}_j$  oszlopvektorokból képezett mátrixot jelölje  $\mathbf{B}$ . Az ortogonalizációs eljárás pedig a következő:

$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{a}_1; \quad \mathbf{b}_j = \mathbf{a}_j - \sum_{i=1}^{j-1} \rho_{ij} \cdot \mathbf{b}_i; \quad \text{ahol} \quad \rho_{ij} = \frac{\langle \mathbf{b}_i, \mathbf{a}_j \rangle}{\|\mathbf{b}_i\|^2}; \quad (2.43)$$

Ha ezeket a formulákat átrendezzük az  $\mathbf{a}_j$  vektorokra akkor a következő adódik:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \mathbf{b}_1; \\ \mathbf{a}_j &= \mathbf{b}_j + \sum_{i=1}^{j-1} \rho_{ij} \cdot \mathbf{b}_i; \quad \text{ahol} \quad \rho_{ij} = \frac{\langle \mathbf{b}_i, \mathbf{a}_j \rangle}{\|\mathbf{b}_i\|^2}; \end{aligned} \quad (2.44)$$

Ha alkalmazzuk a már definiált  $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_j]$ ;  $\mathbf{B} = [\mathbf{b}_j]$ ;  $j = 1, 2, \dots, n$  jelöléseket és értelmezzük a  $\rho_{ij}$  együtthatókból álló  $\mathbf{P}$  felső háromszögmátrixot – melynek főátlójában csupa 1-esek állnak, a főátló alatt pedig zérusok – akkor (2.44) alapján világos, hogy az  $\mathbf{A}$  mátrix előáll  $\mathbf{A} = \mathbf{BP}$  alakban. (A szakirodalom ezt a felbontást QR-felbontásnak nevezi és az általam  $\mathbf{P}$ -vel jelölt mátrixot  $\mathbf{R}$ -rel, a  $\mathbf{B}$ -vel jelölt mátrixot pedig  $\mathbf{Q}$ -val jelöli. Én azonban ezt tanácsosnak gondolom elkerülni, mert félreértések forrása lehet. Megjegyzem, hogy a MATLAB egyetlen utasítással elvégzi a QR-felbontást, de tekintettel a (2.43–2.44) formulák egyszerűségére, ezt tudatosan nem alkalmaztam, hanem kódoltam az következőkben leírt algoritmussal együtt.)

A Gauss-féle normálegyenletek megoldására az alábbi módon alkalmazható ez a felbontás. Először is helyettesítsük az  $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$  egyenletben az együtthatómátrixot a  $\mathbf{BP}$  szorzattal, majd szorozzuk meg a rendszer mindkét oldalát a  $\mathbf{B}^*$  transzponált mátrixszal. Ekkor a következőt kapjuk:

$$\mathbf{B}^* \mathbf{BPx} = \mathbf{B}^* \mathbf{y} \quad (2.45)$$

Itt kihasználjuk, hogy a  $\mathbf{B}$  oszlopvektorai ortogonális rendszert alkotnak, egyszerűen mondva  $\mathbf{B}$  ortogonális mátrix. Ugyanis ennek az a közvetlen következménye, hogy a  $\mathbf{D} := \mathbf{B}^* \mathbf{B}$  mátrix diagonális. Világos, hogy ez jelentősen csökkenti az invertálás problematikáját, hiszen ennek inverze egyszerűen úgy adódik, hogy minden diagonális elemnek képezzük a reciprokát.  $\mathbf{D}$  inverzével megszorozzuk a (2.45) rendszer mindkét oldalát balról, majd ugyanezt tesszük a  $\mathbf{P}$  felső háromszög mátrixszal, amelynek inverze szintén problémamentes, és kezünkben a megoldás:

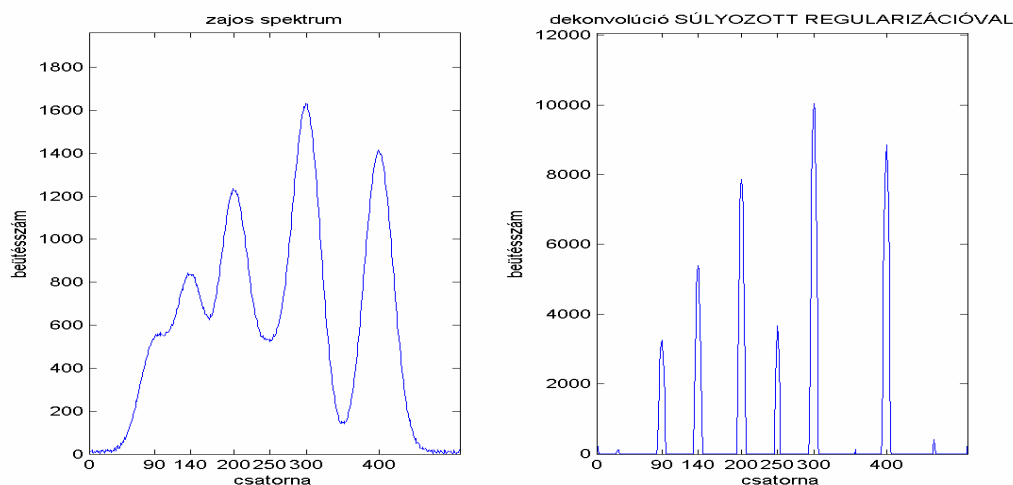
$$\mathbf{Px} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{B}^* \mathbf{y}; \quad \mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{B}^* \mathbf{y} \quad (2.46)$$

A megoldás menete tehát a következő. Alkalmazzuk a II.4.1. pontban leírt súlyozott regularizációs technikát tehát a (2.42) iterációt úgy, hogy minden iterációs lépésben az  $\mathbf{A}$  mátrixot – amely lépésről lépésre változik – a Gram-Schmidt ortogonalizációval faktorizáljuk, és az inverz mátrixot a (2.46) formulával számítjuk. Bár elméletileg egyenértékű, számítástechnikai okok miatt célszerű a (2.43) formulák helyett – ahol a  $\rho_{ij}$  konstansokat oszloponként számoljuk – az ortogonalizációnak az alábbi átrendezését alkalmazni – ahol a  $\rho_{ij}$  konstansokat soronként számítjuk –, mert ez utóbbi numerikusan stabilabb, nem örökíti úgy a számítási hibákat.



$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_j^{(0)} &= \mathbf{a}_j; \quad j = 1, 2, \dots, n; \\
\mathbf{b}_i &= \mathbf{a}_i^{(i-1)}; \quad i = 1, 2, \dots, n; \\
\mathbf{a}_j^{(i)} &= \mathbf{a}_j^{(i-1)} \rho_{ij} \mathbf{b}_i; \quad \rho_{ij} = \frac{\langle \mathbf{b}_i, \mathbf{a}_j^{(i-1)} \rangle}{\|\mathbf{b}_i\|^2}
\end{aligned}
\tag{2.47}$$

A számítások – tekintettel arra, hogy nem gépi kódú program fut, mint a MATLAB-ba beépített LU-felbontás esetén, hanem kódolt algoritmus, amit fordítani kell – ugyanannyi lépésszám esetén több időt vesznek igénybe, mint a II.4.1. pontban, de nincs is szükség túl sok lépésre, a megoldás relatíve kis számú iteráció után igen jó paraméterekkel bír. A II.21. ábrán látható egy 30 lépéses iteráció eredménye  $\alpha = 10^{-7}$  regularizációs paraméter és  $\beta = 1000$  súlyfaktor mellett. A számítások időtartama 104,1s volt.

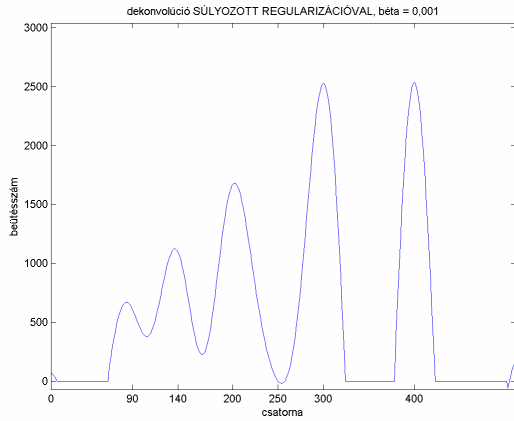


II.21. ábra. Dekonvolúció súlyozott regularizációval, QR-felbontással, 30 lépés után

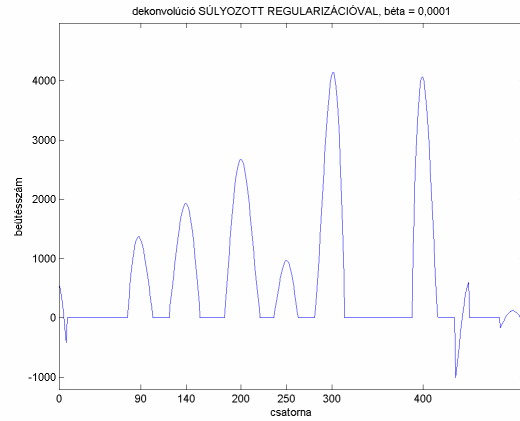
A megoldás numerikus adatait a II.10. táblázatban találjuk. Mint látható, már 30 lépés után megkapjuk a csúcsok egzakt pozícióját – az 1. csúcs esetén az LU-felbontás ezt 100 lépés után is 1-cellányi hibával szolgáltatva – és a megoldás felbontóképessége is ugyanolyan kiváló, mint az előző pontban.

Sorszám	Egzakt pozíció	Számított pozíció	Abszolút eltérés	Szórás	Félérték szélesség
1.	90	89,73	-0,27	1,40	3,31
2.	140	140,00	0,00	1,44	3,40
3.	200	200,00	0,00	1,37	3,23
4.	250	249,78	-0,22	1,52	3,59
5.	300	299,99	-0,01	1,36	3,21
6.	400	399,84	-0,16	1,37	3,22

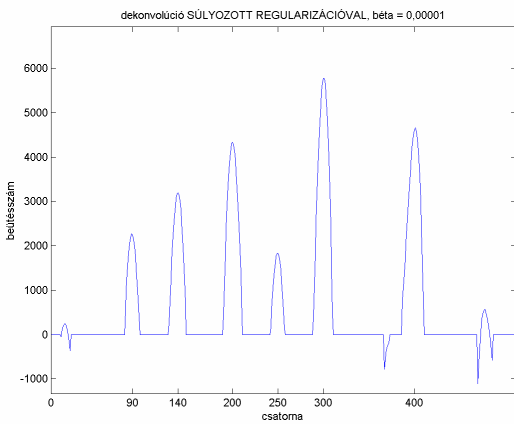
II.10. táblázat. Súlyozott regularizáció módszerével kapott megoldás 30 iterációs lépés után, QR-felbontás alkalmazásával



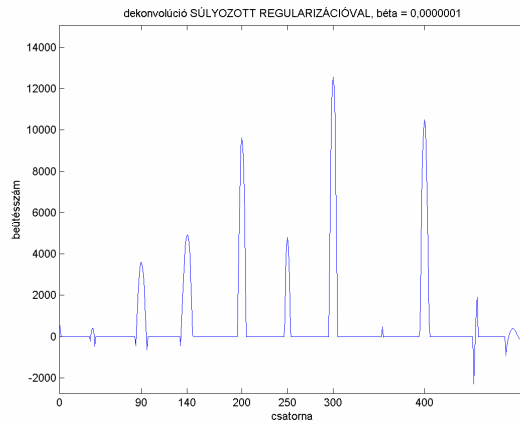
a)



b)



c)



d)

**II.22. ábra. A regularizációs paraméter hatása a megoldásra. Az a), b), c) és d) ábrákon az  $\alpha$  értéke rendre  $10^{-3}$ ;  $10^{-4}$ ;  $10^{-5}$  és  $10^{-7}$ .**

A II.4.1. pontban szemléltettük a  $\beta$  paraméter hatását a megoldásra. A témakör lezárásaképpen most az  $\alpha$  regularizációs paraméter változtatásának hatását fogom érzékeltetni a II.22. ábrán egy mindössze 10 lépéses iterációban, ahol az a), b), c) és d) ábrákon az  $\alpha$  értéke rendre  $10^{-3}$ ;  $10^{-4}$ ;  $10^{-5}$  és  $10^{-7}$ .

Ahogy azt intuitíve elvárjuk, a megoldások annál jobban közelítik az egzakt Dirac-deltákat, minél kisebb a regularizációs paraméter értéke. Azért csak most mutatunk rá erre a tényre, mert az eddigiekben tárgyalt algoritmusok sokkal érzékenyebbek voltak az  $\alpha$  megválasztására, sokkal körültekintőbben kellett eljárni, precízebb hangolást igényelt a konvergencia, ellenkező esetben erősen oszcilláló megoldások adódtak. Ebben az esetben azonban igen tág értékhatárok között bekövetkezik a konvergencia. A tapasztalatok szerint azonban itt sem lehet  $\alpha$  értékét  $10^{-7}$ -nél kisebbnek választani, mert a megoldások ebben az esetben is erősen oszcillálni kezdenek, és megjelenik számos hamis csúcs.

## II.5. DEKONVOLÚCIÓ A MAXIMUM-LIKELIHOOD ELV ALKALMAZÁSÁVAL

A maximum-likelihood becslés (a továbbiakban röviden M-L) – amelyet magyarul a „legnagyobb valószínűség elvének” lehetne fordítani –, a valószínűségelmélet igen hatékony eszköze [55-59] és a statisztikában is alkalmazzák a paraméterbecslések témakörében [60-66]. Két okból kifolyólag tárgyaljuk a kérdést. Egyrészt azért mert a szakirodalomban közismert, gyakran alkalmazott módszer, és mint az a II.5.2. pontban majd kiderül, sikerült javítani a tulajdonságain. Másrészt pedig azért, mert nem csak dekonvolúcióra alkalmazható, hanem ahogyan ez a III. fejezetben kiderül, több izotóp együttes jelenléte esetén az egyes izotópok fajlagos aktivitásának meghatározására is.

Tegyük fel, hogy adott egy szabad paraméterekkel leírt modell, amellyel feltevéseink szerint leírható az általunk vizsgált rendszer. A paramétereket mérés útján határozzuk meg, de a mérési adatok zajjal terheltek. Ez azt jelenti, hogy magukat a paramétereket nem tudjuk megmérni csak egy-egy valószínűségi változót, amely összefüggésben áll a modell paramétereivel. A mérés szempontjából a modell paramétere is valószínűségi változóknak tekintendők. A kérdés az, hogy a mért értékekből hogyan határozzuk meg a modell paramétereit, hogy a lehető legpontosabb becslést kapjuk. A M-L becslés, azaz a legnagyobb valószínűség elvének lényege a következőt jelenti: maximalizálni kell a

$$P(\text{ez a mérési eredmény} \mid \text{a paraméterek értéke ennyi és ennyi})$$

feltételes valószínűséget, ahol hangsúlyozottan a függvény változói a paraméterek. Ha feltesszük, hogy  $\alpha \in \mathfrak{R}^k$  jelöli az ismeretlen paraméterek vektorát (esetünkben az ismeretlen spektrumot leíró paramétereket),  $y \in \mathfrak{R}^m$  pedig a méréssel kapott adatok vektora (a detektorral mért spektrum), akkor a Bayes-formula az alábbi alakban írható:

$$P(\alpha|y) = \frac{P(\alpha)P(y|\alpha)}{P(y)} \quad (2.48)$$

Itt a  $P(\alpha)$  valószínűséget „a priori” valószínűségnek, a  $P(\alpha|y)$  valószínűséget „a posteriori valószínűségnek”,  $P(y|\alpha)$  feltételes valószínűséget pedig „likelihood valószínűségnek” nevezzük. Legyen most  $y_0$  egy konkrét mérési adatokat tartalmazó vektor. Ekkor az  $L(\alpha) = P(y = y_0 | \alpha)$  függvényt – amely az  $\alpha$  változó, tehát a paraméterek függvénye –, **likelihood függvénynek** nevezzük.

Kissé általánosabban, jelölje  $f(y | \alpha)$  a mérési adatok  $y = (y_1, y_2, \dots, y_m)$  vektorához tartozó valószínűség eloszlás együttes sűrűségfüggvényét, rögzített  $\alpha \in \mathfrak{R}^k$  paramétervektor esetén:

$$f(y | \alpha) = f(y_1, y_2, \dots, y_m | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) \quad (2.49)$$

Abban az esetben, ha az egyes mérési adatok egymástól függetlenek – amelyet a bevett gyakorlat szerint gamma-spektrumok esetében feltételezünk –, az együttes sűrűségfüggvény az egyes mérési adatokhoz tartozó egyedi sűrűségfüggvények szorzataként írható fel:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\alpha}) &= f(y_1, y_2, \dots, y_m \mid \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) = \\ &= f_1(y_1 \mid \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) \cdot f_2(y_2 \mid \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) \cdot \dots \cdot f_m(y_m \mid \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) = \prod_{i=1}^m f_i(y_i \mid \boldsymbol{\alpha}) \end{aligned} \quad (2.50)$$

A M-L módszer lényege ezek után úgy fogalmazható, hogy egy feltételezett modell és adott mérési adatok esetén a modellnek eleget tevő sűrűségfüggvények között meghatározandó az a sűrűségfüggvény, amely a legnagyobb valószínűséggel illeszkedik a mérési adatokhoz. A likelihood függvényt ezek után az  $L(\boldsymbol{\alpha}) = f(\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\alpha})$  módon értelmezzük. A M-L módszer alkalmazása során tehát az  $\boldsymbol{\alpha} \mapsto L(\boldsymbol{\alpha})$  likelihood függvény maximumhelyét keressük. Abban az esetben ha a likelihood függvény (2.50) szerint szorzat alakú, egyszerűbb az  $\boldsymbol{\alpha} \mapsto \ln L(\boldsymbol{\alpha})$  ún. log-likelihood függvény maximumhelyét meghatározni. Ismerve a logaritmusfüggvény analitikus tulajdonságait, világos, hogy ez a módosítás nem változtatja meg a szélsőérték helyeket. A log-likelihood függvény alakja:

$$\ln L(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{i=1}^m \ln f_i(y_i \mid \boldsymbol{\alpha}) = \sum_{i=1}^m \ln f_i(y_i \mid \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) \quad (2.51)$$

A szélsőérték létezésének szükséges feltétele, hogy az  $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^k$  paraméter komponensei kielégítsék az ún. „likelihood egyenleteket”:

$$\frac{\partial \ln L(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k)}{\partial \alpha_s} = 0; \quad (s = 1, 2, \dots, k) \quad (2.52)$$

Ez a maximális valószínűség elv vázlata. A következő pontban ezt az elvet alkalmazzuk gamma spektrumok vizsgálatára, de nem a (2.52) egyenletek analitikus megoldásával, hanem iterációs környezetben [66].

### II.5.1. DEKONVOLÚCIÓ A MAXIMUM LIKELIHOOD BECSLÉS ÉS A VÁRHATÓ ÉRTÉK MAXIMALIZÁLÁSÁNAK ELVE ALAPJÁN

Jelölje  $P(y_i, \lambda_i)$  annak az eseménynek a valószínűségét, hogy az  $i$ -edik csatornában a regisztrált fotonszám, azaz a beütésszám az  $i$ -edik csatornában  $y_i$ , feltéve, hogy a modell szerinti beütésszám várható értéke  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2, \dots, m$ ). A tapasztalatok szerint, ha radioaktív bomlásról van szó, a számláló berendezéssel regisztrált beütésszám Poisson-eloszlást követ [55], melynek várható értéke a fent bevezetett jelölés szerint éppen  $\lambda_i$ . Ebből következik, hogy

$$P(y_i, \lambda_i) = \frac{\lambda_i^{y_i}}{(y_i)!} \cdot \exp(-\lambda_i) \quad (2.53)$$

ezért – alkalmazva a függetlenségre vonatkozó megállapodást – a likelihood függvény a következő konkrét alakot ölti:

$$L(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) = \prod_{i=1}^m \frac{\lambda_i^{y_i}}{(y_i)!} \cdot \exp(-\lambda_i) \quad (2.54)$$

Ha képezzük a függvény logaritmusát, megkapjuk a log-likelihood függvényt:

$$\ln L(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) = \sum_{i=1}^m \ln \left( \frac{\lambda_i^{y_i}}{(y_i)!} \cdot \exp(-\lambda_i) \right) = \sum_{i=1}^m (y_i \ln(\lambda_i) - \lambda_i) + \text{állandó} \quad (2.55)$$

A konkrét számítások akkor végezhetőek el, tehát a (2.52) likelihood egyenletek akkor oldhatók meg, ha a  $\lambda_i = \lambda_i(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k)$  várható értékekre konkrét matematikai modell van a birtokunkban.

A gyakorlatban iterációs módszert alkalmaznak a log-likelihood függvény maximumának meghatározására. Az eljárás a **várható érték maximalizálása** elnevezést viseli [60]. Ennek lényege a következő: az  $\ln L(\alpha)$  függvény maximumát lépésenkénti közelítéssel határozzuk meg. Bizonyítható a következő: ha  $\alpha^{(k)}$  a k-adik lépésben az optimális megoldást szolgáltató paraméterek vektora, akkor a (k+1)-edik lépésben a paraméterek optimális értékeit a  $\alpha^{(k+1)} = \max_{\alpha} E[\ln f(y|\alpha)]$  formula szolgáltatja ahol  $f(y|\alpha)$  a (2.49)-ben szereplő függvény és E jelöli a várható értéket. Ennek alapján az iteráció két lépésből áll:

**1. lépés: (A várható érték számítása)** Az  $\alpha^{(k)}$  k-adik közelítés birtokában meg kell határoznunk az  $E[\ln P(y, z_r|\alpha)]$  feltételes várható értéket.

**2. lépés: (Maximalizálás)** Maximalizálni kell a várható értéket az  $\alpha$  paraméterek szerint. A maximumhely szolgáltatja a (k+1)-edik  $\alpha^{(k+1)}$  közelítést.

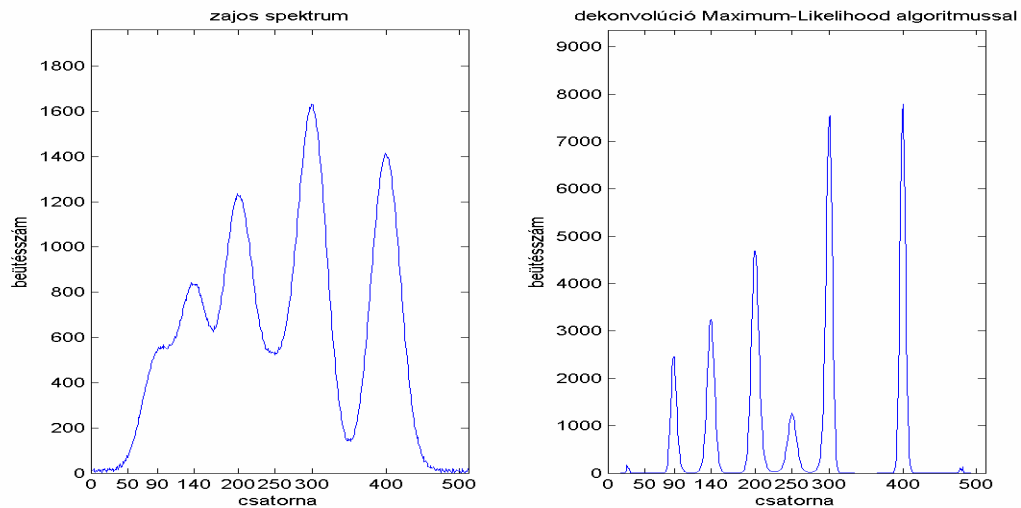
Ha alkalmazzuk ezt az eljárást gamma-spektrumokra, azaz konkrétan a Poisson-eloszlásra [55], akkor a  $\lambda_j$  paraméterekre vonatkozó iterációs formula végül a következő, igen egyszerű alakot ölti [35,61,66]:

$$\lambda_j^{(k+1)} = \sum_{i=1}^m y_i \cdot \frac{R_{ij} \lambda_j^{(k)}}{\sum_{j=1}^n R_{ij} \lambda_j^{(k)}} = \lambda_j^{(k)} \frac{\sum_{i=1}^m y_i R_{ij}}{\sum_{j=1}^n R_{ij} \lambda_j^{(k)}} \quad (2.56)$$

A (2.56) formula tehát a valós spektrumkomponensek átlagértékére vonatkozó iterációs formula. Mivel  $\lambda_j$  az  $x_j$  átlaga, gyakorlatilag ugyanez szolgál az  $x_j$  tényleges fotonszámok iterációs becslésére is. A M-L becslés és a várható érték maximalizálásának elve ezek szerint a következő iterációs formulát szolgáltatja.

$$x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} \frac{\sum_{i=1}^m y_i R_{ij}}{\sum_{j=1}^n R_{ij} x_j^{(k)}} \quad (2.57)$$

Az iteráció kezdőértékéül az  $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{y}$  értéket, tehát a mért spektrumot választjuk.



**II.23. ábra. Dekonvolúció Maximum-Likelihood elv alkalmazásával 1000 lépésben**

A módszer előnye – a formula egyszerűségén túl –, hogy közvetlenül alkalmazható az  $\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  egyenletrendszerre, nem kell áttérnünk a Gauss-féle normálegyenletre, mert sem a mátrix szimmetriája sem a pozitív definitésége nem kritérium, az sem szükséges, hogy  $\mathbf{R}$  kvadratikusan legyen. Mivel minden adat – az  $R_{ij}$  mátrixkomponensek és az  $\mathbf{y}$  induló megoldás – nem negatív, így a (2.57) formulára tekintve világos, hogy a közelítő megoldások minden iterációs lépésben nem negatívak. Lássuk, hogyan működik a módszer a korábbiakban már számos esetben megvizsgált zajos spektrum esetében! A II.23. ábrán látható egy 1000 lépéses iteráció eredménye. A számítások időtartama 7,54s, az eltérés normája pedig:  $\|\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{y}\| = 247,39$ , ami meglehetősen nagy érték, erre a problémára még visszatérünk. A II.11. táblázat tartalmazza a megoldás numerikus adatait. Ebből kiderül, hogy a pozíciókat nagyon pontosan megkapjuk már 1000 lépés után is, de a felbontás meglehetősen rossznak mondható, ennél még a klasszikus lineáris algebrai iterációk is jobb felbontást szolgáltattak.

Sorszám	Egzakt pozíció	Számított pozíció	Abszolút eltérés	Szórás	Félérték szélesség
1.	90	89,84	-0,16	3,98	9,37
2.	140	139,66	-0,34	4,97	11,73
3.	200	199,94	-0,06	5,13	12,01
4.	250	249,84	-0,16	4,16	14,08
5.	300	299,82	-0,18	5,98	9,81
6.	400	400,09	0,09	3,65	8,61

**II.11. táblázat. A Maximum-Likelihood elv alkalmazásával kapott megoldás 1000 lépés után**

Szakirodalmi források szerint [35,61,66] ez a legjobb felbontású iterációs módszer, de ezzel vitatkoznom kell. A II.3. pontban ismertetett algoritmusok ebből a szempontból sokkal jobbnak

mutatkoztak, és ki kell emelnem azt is, hogy az iteráció nagyon lassan konvergál, ezt jelzi az  $\|Ax^{(k)} - y\| = 247,39$  eltérés mértéke is, de erre vonatkozó adatokat tartalmaz a II.12. táblázat.

Lépésszám	Időtartam	Eltérésnorma	j = 90	j = 140	j = 200	j = 250	j = 300	j = 400
2000	21,68s	190,9	7,99	9,96	10,3	11,71	8,69	7,68
5000	106,33s	156,1	6,12	8,08	8,41	9,35	7,25	6,97
10000	390,66s	145,4	4,95	6,93	7,23	7,99	6,44	6,45

II.12. táblázat. A Maximum-Likelihood iteráció által adott megoldás tulajdonságai különböző számú iterációs lépés esetén

Ebben különböző számú iteráció eredményeként adódó megoldások esetére a számítások időtartama, az  $\|Ax^{(k)} - y\|$  eltérések és az egyes csúcsok fél-érték szélessége található. Az egyes megoldásokat helytakarékoságból nem ábrázoltuk, de az adatok alapján világos, hogy alig tapasztalnánk látható változást a II.23. ábra megoldásához képest. A táblázatból világosan kiderül, hogy a konvergencia valóban nagyon lassú, bár az egyes csúcsok szórása monoton módon csökken, a befektetett idővel nem áll arányban a megoldás tulajdonságainak javulása. Még 10000 lépés esetén is 145,4 az eltérés, ez pedig nem fogadható el jó megoldásnak. A csúcsok pozícióit nem jelöltük, hiszen azok már 1000 lépés után is megfelelőek voltak, de a felbontóképesség kívánni valót hagy maga után. Ezért módosítunk az algoritmuson, egészen pontosan kiegészítjük azt, annak érdekében, hogy jobb felbontású megoldást kapjunk, relatíve rövid, de legalábbis a táblázatos értékeknél rövidebb idő alatt.

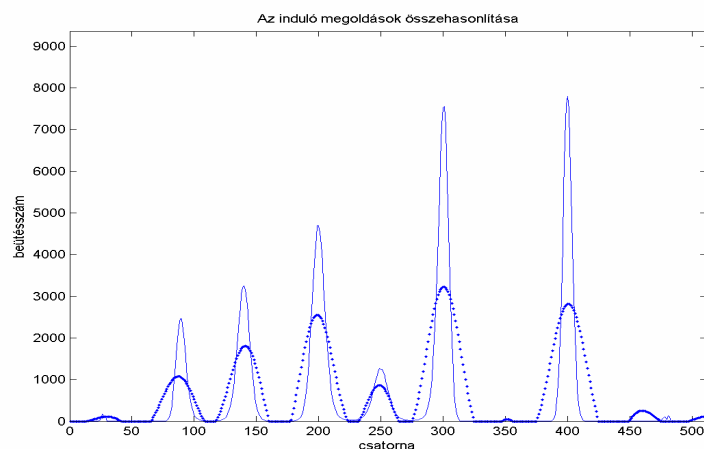
## II.5.2. A MAXIMUM-LIKELIHOOD ALGORITMUS FELBONTÁSÁNAK JAVÍTÁSA AZ AKTÍV HALMAZOK MÓDSZERÉNEK ALKALMAZÁSÁVAL

A II.5.1. pontban részletesen vizsgált algoritmus felbontásának javítására elsőként megpróbáltam felhasználni azokat az eljárásokat amelyek a korábbiakban már beváltak, így a konjugált gradiens módszert illetve a szinguláris felbontást, de ezek egyike sem bizonyult hatékonynak.

Az aktív halmazok módszerének alkalmazása pedig ahhoz a feltételhez kötött, hogy a megoldásnak legyenek 0 komponensei, hiszen az aktív halmaz éppen ezek alapján van értelmezve, az eljárásnak éppen ez a lényege. Ha rátekintünk a legnagyobb valószínűség módszerével kapott bármelyik megoldásra, feltűnő, hogy gyakorlatilag nincs nulla komponense, minden koordináta szigorúan pozitív, azonban ezek között számos olyan van, amelyek nagyságrendje  $10^{-2}$ – $10^{-9}$ , mivel beütésszámokról van szó, ezek gyakorlatilag nullák. Olyan extrém esetekkel is találkozunk, amikor a koordináta  $10^{-100}$  nagyságrendű. Ha figyelembe vesszük a MATLAB számítási pontosságát, az „eps” =  $2,22 \cdot 10^{-16}$  értéket, világos, hogy ez

utóbbiaknak semmi értelme nincs, tehát gyakorlatilag ezek is zérusnak vehetőek. Ezeket tehát nullának tekinthetjük, de ennél tovább is lépünk. Használjuk fel, hogy az egyes csatornában a beütésszám Poisson-eloszlással írható le. Egy-egy csatornában a beütésszám szórása – amely a beütésszám négyzetgyöke –, a mérés bizonytalanságának a mértéke. Az ebbe a nagyságrendbe tartozó beütésszámok kiértékelése alapján semmiképpen sem mutathatunk ki karakteres fotocúcsokat, így ezek statisztikai okok miatt elhanyagolhatók.

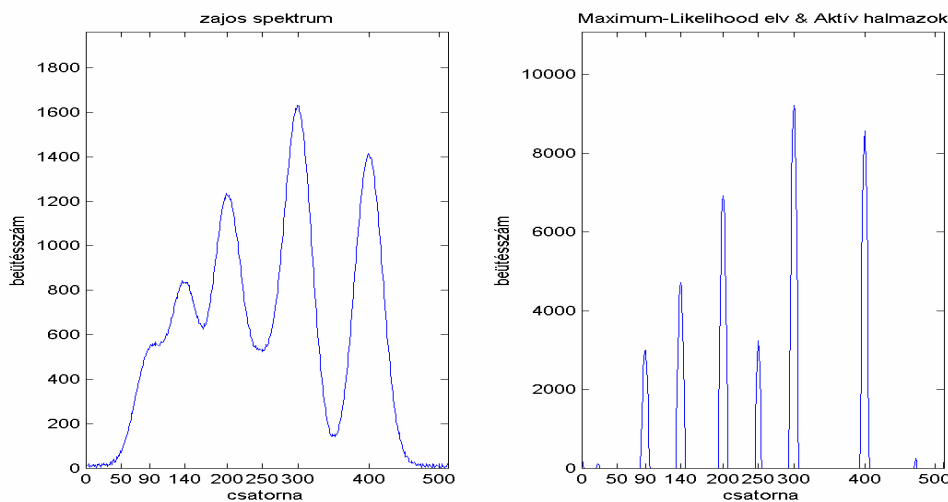
A II.5.1. pontbeli algoritmust a mondottak alapján tehát a következő módon javítjuk. Használjuk fel, hogy a M-L elv 8s idő eltelté, azaz 1000 lépés után egy viszonylag jó, a pozíciók szempontjából kiváló tulajdonságú megoldást ad, amely az adott esetben már elkülönítette az átfedő csúcsokat. Változtassuk 0-vá ennek a megoldásnak mindazokat a koordinátáit, amelyek kisebbek, mint az előző bekezdésben említett szórás, tehát az egy csatornára jutó átlagos beütésszám négyzetgyöke. Ezután ezt a módosított megoldást tekintsük induló megoldásnak egy gyorsabban konvergáló módszer esetében, mint például az „Aktív halmazok & Konjugált gradiensek” algoritmus. Ezt az algoritmust, írtam le a II.3.1. pontban. Az eljárás tehát a következő: „nulladik” iterációként alkalmazzuk a M-L elvet, és az így előálló megoldást – az említett módosítással – tekintjük az egymásba ágyazott iterációk kezdőértékének. Hogy érzékeljük az induló megoldások közötti különbséget, tekintsünk a II.24. ábrára, ahol egyetlen koordinátarendszerben látható a konjugált gradiens módszer illetve a maximális valószínűség elve alapján kapott induló megoldás egy 1000 lépéses iteráció után. (Időben még nyerünk is, hiszen a konjugált gradiens módszerrel 13,5s ideig tart a megoldás előállítása, bár ez nyilván nem lényeges momentum.) Hangsúlyozzuk azonban, hogy a konjugált gradiens módszer csakis szigorúan pozitív definit mátrix esetében konvergál. Így – bár a nulladik iterációs ciklusban az  $\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  egyenletre alkalmazzuk a M-L algoritmust – a továbbiakban át kell térnünk az  $\mathbf{R}^*\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{R}^*\mathbf{y}$  normálegyenletre.



II.24. ábra. A konjugált gradiens módszerrel (pontozott vonal) illetve a Maximum-Likelihood elvvel (folytonos görbe) kapott induló megoldás 1000 lépés után.



Alkalmazzuk tehát az aktív halmazok és konjugált gradiensek egymásba ágyazott algoritmusát úgy, hogy az induló értéket a maximális valószínűség elvével számítjuk. A kezdő iteráció 1000 lépésből, az aktív halmazok külső iterációja 25 ciklusból, a konjugált gradiensek iterációja pedig 20 lépésből áll. A regularizációs paraméter értéke  $\alpha = 10^{-5}$ . Az eredmény a II.25. ábrán látható.



**II.25. ábra. A Maximum-Likelihood elv, az Aktív halmazok és a Konjugált gradiensek módszerének együttes alkalmazása 1000 + 25×20 lépésben**

Azt gondolom az eredmény igen szemléletes. A számításokhoz szükséges időtartam 27,79s, és az eltérés normája  $\|\mathbf{Ax}^{(k)} - \mathbf{y}\| = 10,8$ , ami azt jelenti, hogy nagyságrendileg változatlan idő alatt egy nagyságrenddel javítani tudtunk a megoldás eltérésének normáján, és amint az a II.13. táblázatból kiderül, az egyes csúcsok szórása illetve fél-érték szélessége is számottevő mértékben, mintegy harmadára csökkent.

Sorszám	Egzakt pozíció	Számított pozíció	Abszolút eltérés	Szórás	Félérték szélesség
1.	90	89,96	-0,04	1,40	3,31
2.	140	139,98	-0,02	1,38	3,26
3.	200	200,00	0	1,37	3,23
4.	250	249,99	-0,01	1,47	3,46
5.	300	299,99	-0,01	1,36	3,21
6.	400	400,00	0	1,36	3,21

**II.13. táblázat. A Maximum-Likelihood elv és az Aktív halmazok valamint a Konjugált gradiens módszer együttes alkalmazásával kapott megoldás 1000+25×20 lépés után**

A táblázatból az is kitűnik, hogy a szórás csökkentésével egyetemben a csúcsok pozícióit is sikerült pontosítani egy nagyságrenddel. Összefoglalva elmondhatjuk tehát, az említett három eljárás együttes alkalmazása igen hatékony eljárás és jelentős mértékben jobb megoldást szolgáltat, mint a maximális valószínűség módszer önmagában.

## II.6. A MAXIMUM-ENTRÓPIA MÓDSZER

Az entrópia fogalma megjelenik az információelméletben, a statisztikus fizikában [67, 68], és számos alkalmazásra talál a fizika egyéb területein, a csillagászatban és az orvostudományban. Az entrópia az információ mennyiségének mérésére szolgáló mennyiség, és szoros kapcsolatban áll a valószínűség eloszlás fogalmával is. Definíció szerint  $I(p) = -k \cdot \ln p$  egy  $p$  valószínűségű esemény bekövetkezésével nyert információ [68, 69]. Legyen  $\xi$  egy olyan diszkrét eloszlású valószínűségi változó, melynek eloszlása:  $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ ,  $p_j \geq 0$ ,  $\sum_{j=1}^n p_j = 1$ . Mivel nem tudjuk biztosan, hogy a  $p_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) valószínűségű események

közül melyik esemény következik be, ezért a  $\xi$  valószínűségi változóval kapcsolatosan csak a  $-k \cdot \ln p_j$  információk átlagértékét, az alábbiakban  $E$ -vel jelölt várható értéket kaphatjuk információként. Legyen tehát

$$S(P) = E[-k \cdot \ln p_j] = \sum_{j=1}^n p_j (-k \cdot \ln p_j) = -k \sum_{j=1}^n p_j \cdot \ln p_j \quad (2.58)$$

a  $P$  valószínűség eloszláshoz tartozó információ átlagos mennyisége. Ezt a mennyiséget a  **$P$  valószínűség eloszlás entrópiájának** nevezzük.

A diszkrét valószínűség eloszlás fogalma magától értetődően merül fel a spektrumokkal kapcsolatban, ugyanis ha a regisztrált fotonok száma összesen  $N$  és szokás szerint  $x_j$  jelöli akkor a spektrumban a  $j$ -edik energiatartományba eső fotonok számát, akkor a

$$p_j = \frac{x_j}{N}; (j = 1, 2, \dots, n) \quad (2.59)$$

nem negatív értékek diszkrét valószínűség eloszlást alkotnak.

A gyakorlatnak megfelelően tegyük fel, hogy adott egy  $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$  valószínűség eloszlás. Az egyes események bekövetkezésével kapcsolatban azonban modellfeltevéseink vannak, amely szerint az eloszlás a tényleges  $P$  helyett  $Q = \{q_1, q_2, \dots, q_n\}$ . Mielőtt megfigyeléseinket elvégezzük, egzaktnak a  $P$  valószínűség eloszlás  $S(P) = -\sum_{j=1}^n p_j \cdot \ln p_j$  entrópiája

méri a bizonytalanságunkat, információink hiányát. Ezzel szemben feltevéseinkből ugyanerre a bizonytalanságra az  $S(P, Q) = -\sum_{j=1}^n p_j \cdot \ln q_j$  érték, az ún. kereszt entrópia adódik. A kettő

különbségére a

$$D(P|Q) = S(P, Q) - S(P) = \sum_{j=1}^n p_j \ln p_j - \sum_{j=1}^n p_j \ln q_j = \sum_{j=1}^n p_j \ln \frac{p_j}{q_j} \quad (2.60)$$

kifejezést kapjuk. A  $D(P|Q)$  mennyisége a P valószínűségeloszlás Q eloszlásra vonatkozó **relatív entrópiája**.

A **Maximum Entrópia Módszer** (a továbbiakban röviden MEM) egy olyan eljárás, amellyel a rendelkezésre álló információk birtokában egyértelműen meghatározható az a valószínűség eloszlás, amely egy adott probléma leírásához a legjobban megfelelő, leginkább ésszerű. Tegyük fel, hogy rendelkezünk a probléma leírását elősegítő információval is. Azt állítjuk, hogy ha olyan eloszlást választunk, amelyhez a rendelkezésre álló információkkal összhangban maximális entrópia tartozik, akkor ez a legnagyobb bizonytalanságot jelentő és egyben a leginkább racionális valószínűség eloszlás. Tegyük fel ugyanis, hogy egy ettől eltérő olyan eloszlást választunk, amelynek entrópiája kisebb, tehát kisebb a bizonytalanságunk, kevesebb információt várunk a megoldástól. Ez azt jelenti, hogy olyan információt is feltételeztünk, amellyel nem rendelkezünk. Ha pedig olyan eloszlást választunk, amelyhez az adott feltételekhez tartozó maximumnál nagyobb entrópia tartozik, tehát nagyobb a bizonytalanságunk, akkor az azt jelenti, hogy nem veszünk figyelembe, elhanyagolunk olyan információkat, amelyekkel viszont rendelkezünk. A maximális entrópiájú eloszlás tehát a legésszerűbb megoldás.

## II.6.1. DEKONVOLÚCIÓ MAXIMUM ENTRÓPIA MÓDSZERREL

Kiindulhatnánk a (2.58) entrópiából. Kiszámítva a (2.59) eloszlás entrópiáját, maximalizálás után kapnánk egy iterációs formulát, de sokkal hatékonyabbnak bizonyul a relatív entrópia fogalmára, tehát a (2.60) formulára épülő gondolatmenet alapján adódó iteráció [69-74].

Legyen a valós  $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$  spektrum a P eloszlás megfelelője. A feltevéseink szerinti spektrum pedig legyen az  $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \in \mathfrak{R}^n$  vektorral adva. Ez utóbbi feleljen meg a Q eloszlásnak.

Ekkor az  $\mathbf{x}$  valós spektrum  $\boldsymbol{\lambda}$  modellspektrumra vonatkozó relatív entrópiája  $D(\mathbf{x}|\boldsymbol{\lambda}) = \sum_{j=1}^n x_j \ln \frac{x_j}{\lambda_j}$ .

Könnyen igazolható, hogy  $D(\mathbf{x}|\boldsymbol{\lambda}) \geq 0$ , és pontosan akkor zérus, ha  $\mathbf{x} = \boldsymbol{\lambda}$ . A feladat most abban áll, hogy  $D(\mathbf{x}|\boldsymbol{\lambda})$  értékét minimalizálni kell. Ha összhangot szeretnénk teremteni a maximum-

entrópia elvvel, akkor  $D(\mathbf{x}|\boldsymbol{\lambda})$  minimalizálása helyett maximalizáljuk D ellentettjét. Ismét a

szokásos S jelölést alkalmazva, a feladat az  $S(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = -\sum_{j=1}^n x_j \ln \frac{x_j}{\lambda_j}$  relatív entrópia maximumának

meghatározása. A konkrét fizikai feltevések miatt ezt a formulát azonban egy kissé módosítani kell. A gamma bomlás fizikai tulajdonságaira támaszkodva tudjuk, hogy a j-edik energiatartományba tartozó fotonok száma Poisson-eloszlást követ, melynek átlagértéke  $\lambda_j$  [55].

Modellfeltevésünk tehát az, hogy az átlagos beütésszám  $\lambda_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ). és köztudott, hogy  $\lambda_j$  a Poisson-eloszlás várható értéke. Ebben az esetben annak valószínűsége, hogy a  $j$ -edik energia intervallumban a beütésszám éppen  $x_j$ , az alábbi formulával írható le:

$$P(x_j) = \frac{\lambda_j^{x_j}}{x_j!} \exp(-\lambda_j); j = 1, 2, \dots, n \quad (2.61)$$

A tapasztalatok szerint feltehető, hogy az egyes energiatartományokban a beütésszámok egymástól függetlenek. Ebben az esetben annak valószínűsége, hogy a spektrum éppen  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ , a (2.61) valószínűségek szorzata lesz:

$$P = \prod_{j=1}^n P(x_j) = \prod_{j=1}^n \frac{\lambda_j^{x_j}}{x_j!} \exp(-\lambda_j) \quad (2.62)$$

Keressük azt a spektrumot, amelyre ez a valószínűség maximális. A számítások egyszerűsítése érdekében vegyük (2.62) logaritmusát, majd alkalmazzuk a Stirling-formulát [75-77]. Ekkor a következőt kapjuk:

$$\ln P = \ln \prod_{j=1}^n \frac{\lambda_j^{x_j}}{x_j!} \exp(-\lambda_j) = \sum_{j=1}^n (x_j \ln \lambda_j - \lambda_j - \ln x_j!) = \sum_{j=1}^n \left( (x_j - \lambda_j) - x_j \ln \frac{x_j}{\lambda_j} \right) \quad (2.63)$$

Tehát a spektrum leírásánál természetes módon adódik az entrópia általánosabb formája [67,69,70].

A MEM alkalmazása során, ha csak a nyilvánvaló  $x_1 + x_2 + \dots + x_n = N$  feltételt írjuk elő, akkor az egyenletes eloszlás esetén veszi fel az entrópia a maximumát. Ez nyilván nem egy valós gamma-spektrum. A mérési adatok viszont természetes megszorító feltételeket jelentenek a keresendő spektrumra vonatkozólag, így egy olyan feltételes szélsőérték probléma megoldása a feladat ahol van még egy kiegészítő feltétel, ez pedig a jól ismert  $\chi^2$  statisztika várható értéke. Ha feltételezzük, hogy  $\sigma_i$  az  $i$ -edik csatornában a mérési hiba szórása – amit a Poisson eloszlás

szerint éppen a beütésszám, azaz  $y_i$  négyzetgyöke –, akkor a  $d_i = \sum_{j=1}^n R_{ij} x_j$  ;

( $i = 1, 2, \dots, m$ ) jelölés alkalmazásával az  $m$ -szabadságfokú  $\chi^2$  eloszlás a

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^m \frac{(d_i - y_i)^2}{\sigma_i^2} \quad (2.64)$$

formulával adható meg. Ennek az eloszlásnak a várható értéke közismerten  $m$ , ami ebben az esetben éppen a detektor csatornáinak száma. Ez az információ a gamma spektrum meghatározásához egy járulékos feltétel. A feltételes szélsőérték megállapításához szükséges Lagrange-függvény alakja, a következő:

$$L(x_1, \dots, x_n, \alpha_0, \alpha) = \sum_{j=1}^n \left( (x_j - \lambda_j) - x_j \ln \frac{x_j}{\lambda_j} \right) + \alpha_0 \left( N - \sum_{j=1}^n x_j \right) + \frac{\alpha}{2} \left( m - \sum_{i=1}^m \frac{(d_i - y_i)^2}{\sigma_i^2} \right) \quad (2.65)$$

A szélsőérték probléma megoldása a következő iterációs formulát szolgáltatja:

$$x_j^{(k+1)} = C \cdot x_j^{(k)} \cdot \exp \left( \alpha \cdot \sum_{i=1}^m R_{ij} \frac{(y_i - d_i^{(k)})}{\sigma_i^2} \right) \quad (2.66)$$

ahol a  $C$  konstans az  $\alpha_0$  függvénye. A spektrum nulladik közelítésének, tehát az iteráció kezdőértékének tekintjük az  $x^{(0)} = \left( \frac{N}{n}, \frac{N}{n}, \dots, \frac{N}{n} \right)$  egyenletes eloszlást, és  $k \geq 0$  esetén

alkalmazzuk a (2.66) formulát az értelemszerű  $d_i^{(k)} = \sum_{j=1}^n R_{ij} x_j^{(k)}$  definíció mellett. A  $C$  konstans az

$\alpha_0$  állandó függvénye, ami pedig az  $\alpha$  konstanstól függ. Feladatunk kizárólag az  $\alpha$  paraméter meghatározása.

Az első módszer alkalmazása során a  $\alpha$  értékét próbálgatással határozzuk meg. Ennek lényege, hogy elsőként annyira kicsire választjuk  $\alpha$ -t, hogy az iteráció konvergáljon. Ezek után  $\alpha$  értékét növeljük addig – minden egyes esetben lefuttatva az iterációt –, amíg a  $\chi^2$  értéke el nem éri a várható értékét,  $m$ -et. Az ilyen módon kapott megoldást fogadjuk el ideális spektrumnak.

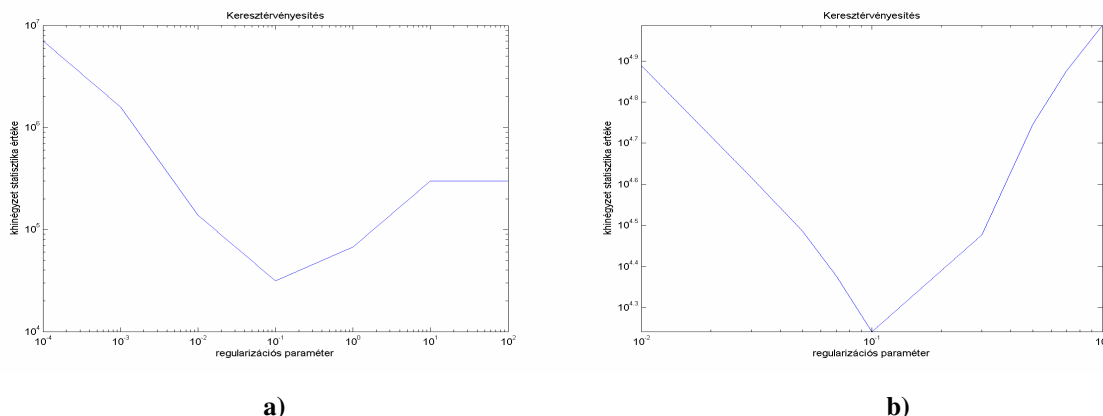
Ettől elegánsabb módszer  $\alpha$  megválasztására a **kereszt érvényesítési eljárás**. Ez egy optimalizálási eljárás, melynek során  $\alpha$  értékét szisztematikusan és egyértelműen határozhatjuk meg az alábbi módon. A módszer lényege abban áll, hogy az  $y_i$  ( $i$  rögzített) adatot megbecsüljük a többi,  $y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_m$  mérési adat birtokában. Ezen  $m - 1$  db adat felhasználásával előállítjuk az  $x_{1(i)}, \dots, x_{n(i)}$  megoldásvektort, ahol az  $(i)$  index arra utal, hogy az  $y_i$  érték becsléséről van szó. Az  $x_{j(i)}$  megoldások ismeretében az  $y_{i(i)}(\alpha)$  becslt érték az  $y_{i(i)}(\alpha) = \sum_{j=1}^n R_{ij} x_{j(i)}$  formulával adódik. Az  $\alpha$  paraméter értékéül azt a valós számot választjuk

melynek alkalmazásával a legjobb becslést kapjuk az  $y_i$  mérési adatokra vonatkozólag. Konkrétabban azt az  $\alpha$  értéket alkalmazzuk az iterációban, amelyre a becslt értékek és a mérési eredmények közötti négyzetes eltérés átlaga minimális. Definiáljuk ebből a célból a

$$C(\alpha) = \sum_{i=1}^m \frac{(y_{i(i)}(\alpha) - y_i)^2}{\sigma_i^2} \quad (2.67)$$

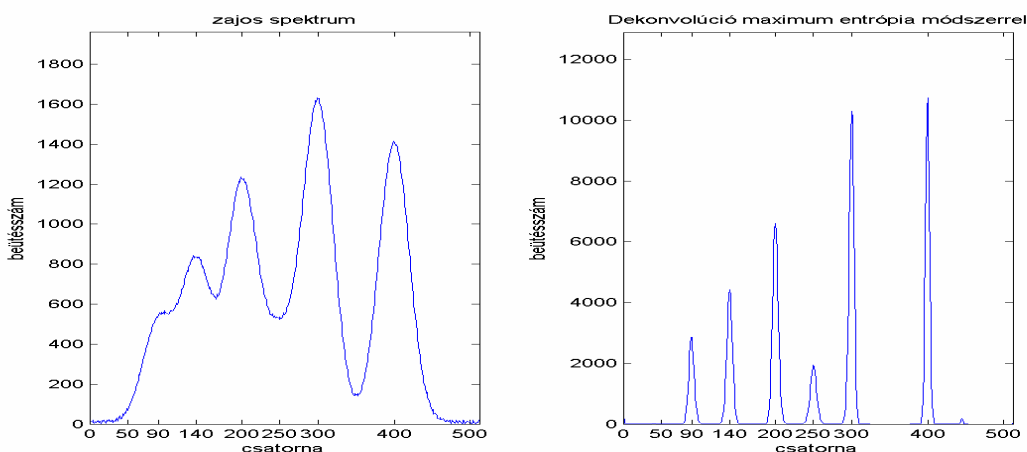
függvényt. Az  $\alpha$  optimális értékét a  $C(\alpha)$  minimumhelye szolgáltatja. A II.26. a) és b) ábrákon látható a  $C(\alpha)$  függvény néhány  $\alpha$  esetére kiszámítva. A számításokat először alacsony lépésszámmal, az  $\alpha$ -ra vonatkozólag nagyobb léptékben,  $10^{-4}$  értéktől  $10^2$ -ig változtattam, az eredmény látható az a) ábrán, majd ezt tovább finomítottam, nagyobb iterációs lépésszámmal kisebb lépésközzel, ezt ábrázolja a b) ábra grafikonja. Mindkét koordináta rendszerben mindkét tengelyen logaritmusos skálázást választottam, így az eredmény sokkal szemléletesebb. A

vizsgált esetben az  $\alpha = 0,1$  paraméter választása tűnik a legcélszerűbbnek, de világos, hogy ezt a vizsgálatot minden konkrét  $\mathbf{R}$  és  $\mathbf{y}$  esetén el kell végezni.



II.26. ábra. Az  $\alpha$  paraméter ideális értékének meghatározása keresztértvényesítéssel

Sőt meg kell jegyeznünk, hogy a tapasztalat szerint,  $\chi^2$  értéke erősen függ a lépésszámtól, így célszerű az előzőekben kapott minimumhely környékén lefuttatni az algoritmust. Ezek alapján az  $\alpha$  paraméter értékéül és végül a 0,8 konstanst választottuk. Ennek alkalmazásával végeztük el a dekonvolúciót a MEM alkalmazásával. Az 5000 lépéses iteráció eredménye a II.27. ábrán látható. Annak érdekében, hogy érzékeljük a konvergencia tulajdonságait, a II.14. táblázatban összefoglaltuk 1000, 2000 és 5000 lépéses iteráció eredményeképpen adódó megoldások tulajdonságait. A táblázatból kitűnik, hogy a pozíciók egy kivétellel már 1000 lépés után pontosan adódnak, de 2000 lépés után már minden csúcs helye (a kerekítés szabályai szerint) egzaktul adódik. A felbontóképesség azonban nem ideális, a korábbiakhoz képest túl nagy, és ez az érték az iterációk számának növelésével nem csökken kellő intenzitással.



II.27. ábra. Dekonvolúció MEM alkalmazásával 5000 lépésben.

(A helyzet nagyon hasonlít ahhoz, amit a M-L-elv alkalmazásánál tapasztaltunk.) Azonban világosan látszik, hogy az iterációk során a csúcsok pozíciója egyre pontosabb, a félérték szélesség is monoton csökken, ezzel párhuzamosan csökken az  $\|\mathbf{Ax}^{(k)} - \mathbf{y}\|$  eltérés-norma és a  $\chi^2$

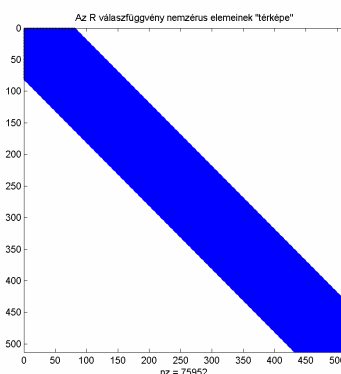
statisztika értéke. A konvergencia tehát stabil, csak lassú. A megoldások adatainak tanulmányozása során figyelembe kell vennünk, hogy – tekintettel arra, hogy modellszámításainkat 512 csatornás analízátorra vonatkoztatjuk –  $\chi^2$  értéke a pontos megoldásra vonatkozólag 512.

	időtartam	Norma	$\chi^2$		x = 90	x = 140	x = 200	x = 250	x = 300	x = 400
1000 lépés	1,15s	284,2	653,1	poz.	89,13	139,55	199,95	249,97	299,86	400,03
				w	11,42	12,65	12,91	15,04	10,18	8,92
2000 lépés	13,1s	218,2	601,7	poz.	89,56	139,68	200,05	249,95	299,63	400,01
				w	10,12	10,83	10,95	12,40	8,99	7,61
5000 lépés	79,8s	175,1	574,3	poz.	89,89	139,73	200,05	249,95	299,73	399,91
				w.	8,61	8,85	8,88	9,87	7,46	6,14

II.14. táblázat. A maximum entrópia módszerrel kapott megoldások adatai 1000, 2000 és 5000 lépés után (w a félérték szélességet jelöli)

## II.6.2. A „MEM” KONVERGENCIÁJÁNAK GYORSÍTÁSA RITKAMÁTRIXOKKAL

A II.2.2. pontban már foglalkoztunk a ritkamátrixok egy alkalmazási lehetőségével. Emlékeztetünk rá, ez annyit jelent, hogy a gép a mátrixnak kizárólag a nem nulla komponenseit tárolja és csak ezekkel számol, így időt és tárhelyet spórolunk. Ott az algoritmus megkövetelte az áttérést az  $\mathbf{R}^* \mathbf{R}$  mátrixra, most azonban nem a Gauss-féle normálegyenletet oldjuk meg, az  $\mathbf{R}$  válasz mátrix a rendszer együtthatója.



II.28. ábra. Az  $\mathbf{R}$  válasz mátrix nem nulla elemei. Ritkamátrixként csak a sötét sávbéli elemek vannak nyilvántartva

Ennek mindössze 28,9 %-a, 75952 komponens különbözik zérustól, így van rá remény, hogy ha az algoritmusban az  $\mathbf{R}$  válasz mátrixot ritka mátrix formátumban alkalmazzuk, illetve tároljuk, akkor – ellentétben a CG algoritmusnál tapasztaltakkal – számottevően befolyásolja az algoritmus hatékonyságát. A II.28. ábra mutatja az  $\mathbf{R}$  mátrix nem nulla komponenseinek az elhelyezkedését.

A tapasztalat azt mutatja, hogy az időfaktorban mutatkozik egy  $\frac{1}{2}$ -es szorzófaktor, vagyis ritkamátrix alkalmazása esetén az algoritmus futási ideje a felére csökken. Más adatok nyilván

nem változnak, hiszen csak a mátrix tárolásában van különbség, a számítások pontosan megegyeznek. Élve ezzel a időbeli nyereséggel, lefuttattuk a MEM algoritmust 10000 lépésben is. A II.15. táblázat tartalmazza ennek az iterációnak az adatait.

	időtartam	Norma	$\chi^2$		x = 90	x = 140	x = 200	x = 250	x = 300	x = 400
10000 lépés	326,5s	162,3	566,1	poz.	90,03	139,75	200,17	249,94	299,51	399,77
				w	7,52	7,64	7,62	8,41	6,61	5,19

**II.15. táblázat. A maximum entrópia módszerrel kapott megoldás ritkamátrix és 10000 iterációs lépés alkalmazásával**

Ezzel a változtatással sikerült a szórásokat – az 5000 lépésben kapott megoldáshoz viszonyítva – mintegy 30%-kal csökkenteni, és közben megspóroltunk kb. 5perc számítási időt.

## II.7. ÖSSZEGZETT KÖVETKEZTETÉSEK

A II. pontban számos algoritmust leírtam, amelyek között szerepelnek a szakirodalomban gyakran alkalmazott és elismert módszerek (MEM, ML, Gold-algoritmus), eredményesen módosítottam klasszikus iterációs módszereket is (GS, relaxáció), módosítottam a témakörben nélkülözhetetlen regularizációs technikát (Súlyozott regularizáció), vizsgáltam a kitűzött feladatot szélsőérték problémaként (KG, Aktív halmazok) és ugyancsak eredményesen alkalmaztam a lineáris algebra elméleti és numerikus szempontból igen fontos apparátusait (SVD, LU, Cholesky-felbontás, Gram-Schmidt ortogonalizáció). Megvizsgáltam minden esetben az algoritmusok konvergenciájának sebességét, a megoldás felbontását és minden algoritmust implementáltam is. Összehasonlítottam ezeket az algoritmusokat és bebizonyítottam, hogy az általam leírt algoritmusok között egyrészt van olyan, amely a probléma megoldására eredményesen alkalmazható, bár a szakirodalom nem tesz róla említést, ez a Gauss-Seidel iteráció regularizált-relaxált változata, eredményesen alkalmazható. Másrészt leírtam több olyan módszert amely sokkal hatékonyabban működik mint a témakörben szokásosan alkalmazott módszerek. Ezek a következők: A Konjugált gradiens módszer illetve a szinguláris felbontás, az Aktív halmazok módszerével ötvözve; a Súlyozott regularizáció akár a Cholesky-felbontással akár a Gram-Schmidt ortogonalizációval társítva. Bemutattam, hogy ezek a módszerek gyorsabban konvergálnak, kevesebb lépésszámú iterációk keretében, tehát gyorsabban szolgáltatnak eredményt és nagyobb felbontású megoldásokat szolgáltatnak. Végül, sikerült némileg javítanom a szakirodalomban elismert módszereken egyrészt úgy, hogy a mátrixok numerikus reprezentációját másképpen valósítottam meg (MEM), másrészt úgy hogy az adott algoritmust párosítottam egy hatékonynak bizonyult algoritmussal (ML + Aktív halmazok). A témakörrel kapcsolatosan a [36,39,46,66,69] cikkeket publikáltam.



### **III.FEJEZET: AKTIVITÁS MEGHATÁROZÁSA MULTIPLETT FOTOCÚCSOK ESETÉN, A DEKONVOLÚCIÓ MÓDSZEREINEK ALKALMAZÁSA**

A II. fejezetben dekonvolúciós módszerekről volt szó. A vizsgált módszerek mindegyik azt célozta, hogy a spektrum tanulmányozásával lokalizálhatóak legyenek a fotocúcsok, ezáltal azonosítani lehet a sugárzó izotópot. Miután tudjuk milyen izotóp sugároz, a következő kérdés a sugárzás aktivitásának meghatározása. Ehhez elsősorban azt kell meghatározni, mekkora a fotocúcsok alatti tartomány területe, másképpen fogalmazva a teljes energia csúcshoz tartozó beütésszám. Természetesen a teljes beütésszám ismerete is egyenértékű ezzel a kérdéssel, ezek kapcsolatához azonban ismerni kell a detektorra jellemző, energiafüggő, „csúcs per összes” arányt megadó függvényt. Ennek leírásával és kalibrációjával az V. fejezetben részletesen foglalkozom. Ezt minden detektorra kísérletileg kell meghatározni néhány etalonként használt izotóp alkalmazásával. A csúcsterület és az aktivitás között a kapcsolatot egy további adat, a detektor holtideje is meghatározza, amit a spektrum felvétele során a detektor közöl. A két említett paramétert a négy alapl művelettel egyszerűen figyelembe lehet venni abban az esetben, amikor egyetlen izotóp sugároz, mert ebben az esetben egyszerűen össze kell adni az egyes csatornáknak a beütésszámokat. Még egyszerűbb az eset ha az izotópnak csak egy monoenergiás vonala van, mert ekkor csak egy fotocúcs van a spektrumban. Így ezzel a kérdéssel nem foglalkozom.

Sokkal érdekesebb a helyzet, ha a spektrumban több egymáshoz közel eső, egymást részben vagy egészben átfedő fotocúcs van, illetve akkor ha a spektrum annyira összetett, hogy a teljesenergia csúcsok, Compton-tartományok, stb. egymást részben-teljesen átfedik. A következő két pontban ezekben az esetekben javasolok egy-egy lehetséges módszert az aktivitás becslésére. A szakirodalomban található analitikus eljárás a multiplettek szétválasztására [78], de ezek a módszerek nem különösebben hatékonyak.

#### **III.1. CSÚCSTERÜLETEK MEGHATÁROZÁSA MULTIPLETT FOTOCÚCSOK ESETÉN**

Ebben a pontban azt az esetet tárgyalom, amikor a spektrum szerkezete olyan, hogy kettő vagy ennél több fotocúcs koncentrálódik egy szűk tartományra, úgy hogy a Compton tartományok eliminálhatók, kiválasztható a spektrumból egy olyan intervallum, amely csak teljes energia csúcsokat tartalmaz de úgy, hogy a csúcsok kölcsönösen fedik egymást részben vagy egészben.

Azt tudjuk, hogy Gauss görbéket (1.9) kell illeszteni a spektrum adott tartományára. Ezekben ismeretlen a középérték ( $m$ ), a szórás ( $\sigma$ ) és a beütésszám ( $N$ ). A középértékeket egy

alkalmasan választott dekonvolúciós módszerrel meghatározzuk, hiszen azok éppen erre hivatottak. A szórás a detektor adata. A szórással kapcsolatban tudni kell, hogy kismértékben függ a csatornaszámtól, kalibrációs izotópokkal kell meghatározni a szórás-csatorna függvényt. Ez mindenképpen a birtokunkban van, hiszen ezen információ nélkül nincs válasz mátrix sem. Ezt a kérdést részletesen vizsgálom majd a IV. fejezetben.

Tegyük fel, hogy – a dekonvolúció eredményeképpen – tudjuk, hogy a spektrum adott tartományában  $P$  db gamma vonal van részben-egészben átfedve. Voltaképpen ilyen az I.5.b) ábrán látható zajos spektrum, amit a II. fejezetben végig tanulmányoztunk. Erre a spektrumra kell  $P$  db Gauss-görbét illeszteni. Azaz ha  $f_p(x)$  ( $p = 1, 2, \dots, P$ ) jelöli az egyes Gauss-függvényeket és szokásosan  $y$  jelöli a mért spektrumot  $x_j$  pedig a  $j$ -edik csatorna tartalmát ( $j = 1, 2, \dots, m$ ) akkor a feladat olyan  $N_p$  konstansok meghatározása, hogy az

$$y(x_j) \approx \sum_{p=1}^P f_p(x_j) = \sum_{p=1}^P \frac{N_p}{\sqrt{2\pi\sigma_p}} \exp\left(-\frac{(x_j - m_p)^2}{2\sigma_p^2}\right) \quad (3.1)$$

egyenlőség a lehető legkisebb hibával teljesüljön, azaz megoldandó az

$$\left\| y(x_j) - \sum_{p=1}^P \frac{N_p}{\sqrt{2\pi\sigma_p}} \exp\left(-\frac{(x_j - m_p)^2}{2\sigma_p^2}\right) \right\|^2 \rightarrow \text{minimum} \quad (3.2)$$

optimalizálási feladat. Ismét hangsúlyozzuk, hogy a  $\sigma_p$  és  $m_p$  konstansok kísérletileg illetve dekonvolúciós módszerrel meghatározhatók. Egyszerűbb jelöléssel tehát az  $y(x)$  mért spektrumnak és a  $\sum_{p=1}^P N_p f_p(x_j)$  összegnek az eltérését kell minimalizálni Euklideszi normában.

Az egyszerűbb jelölés érdekében vezessük be az  $A_{pj} = f_p(x_j)$  ( $p = 1, 2, \dots, P; j = 1, 2, \dots, m$ ) jelölést. Ezzel kapunk egy  $\mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{n \times P}$  mátrixot. Ha még alkalmazzuk az  $\mathbf{N} = [N_p]_{p=1,2,\dots,P} \in \mathfrak{R}^P$  jelölést akkor világos, hogy végül is az  $\|\mathbf{A} \cdot \mathbf{N} - \mathbf{y}\| \rightarrow \min$ ; minimumfeladatot kell megoldanunk.

A II.2. pontban, a dekonvolúció problémakörében már találkoztunk a legkisebb négyzetek feladatával, csak a jelölések különböztek. Ott is rámutattunk, hogy a legkisebb négyzetek feladatának megoldása egyenértékű a Gauss-féle normálegyenlet megoldásával. Ebben az esetben a Gauss-féle normálegyenlet alakja a következő:  $\mathbf{A}^* \mathbf{A} \mathbf{N} = \mathbf{A}^* \mathbf{y}$ . Tekintettel arra, hogy  $\mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{n \times P}$  miatt  $\mathbf{A}^* \mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{P \times P}$ , ahol  $P$  a fotocsúcsok száma.  $P$  nem lehet nagyon nagy szám, legfeljebb egyjegyű, hiszen különben a szcintillációs detektor nem alkalmas a spektrum felvételére és kiértékelésére. Ennek fényében a normálegyenlet megoldására több lehetőség is kínálkozik:

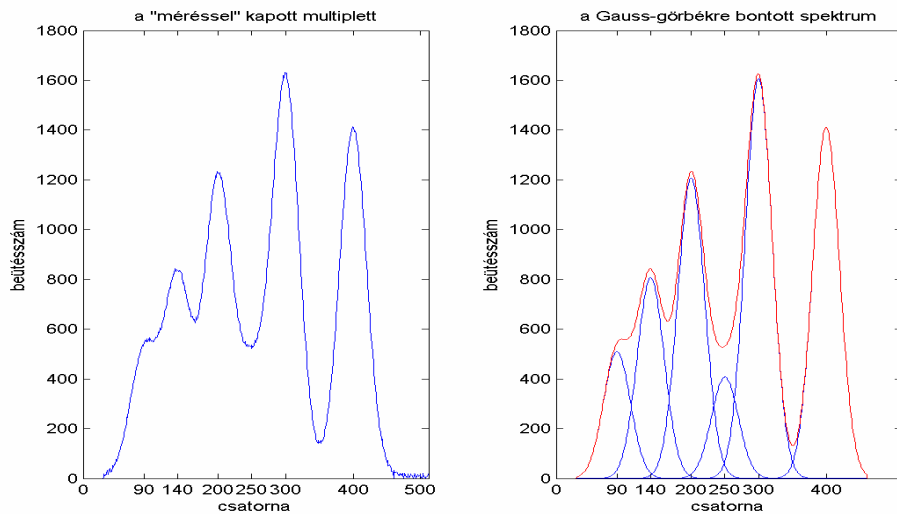
1. Ha  $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$  reguláris, akkor közönséges invertálással:  $\mathbf{N} = (\mathbf{A}^* \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^* \mathbf{y}$ ;
2. Ha  $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$  rosszul kondicionált, akkor szinguláris felbontással:  $\mathbf{N} = (\mathbf{A}^* \mathbf{A})^+ \mathbf{A}^* \mathbf{y}$ ;

3. Ha egyik sem hatékony, akkor iterációval:  $\mathbf{N}^{(k+1)} = \mathbf{N}^{(k)} + (\mathbf{A} * \mathbf{A})^+ (\mathbf{A} * \mathbf{y} - \mathbf{A} * \mathbf{A} \mathbf{N}^{(k)})$ ;

4. Konjugált gradiens módszerrel.

Különösen hangsúlyozzuk a 4. módszert, hiszen mint az a II.2. pontban kiderült, a konjugált gradiens módszer kifejezetten ennek a szélsőérték feladatnak a megoldására lett kifejlesztve, ott láttuk, hogy igen nagy pontossággal szolgáltatja a szélsőértéket jelentő megoldást, szükség esetén igen hatékony eszköz tehát ennek a kérdésnek a megoldására is.

Mind a négy jelzett módszer esetére megtalálható az algoritmus implementációja elektronikusan. A III.1. ábrán látható a már többször vizsgált zajos multipliett spektrum felbontása különálló Gauss-görbékre, illetve látható a kapott görbék összege is.



**III.1. ábra. A multipliett Gauss-féle normálegyenlet megoldásával kapott felbontása**

Megjegyezzük, hogy az egyenlet megoldásához ebben az esetben a hagyományos invertálás is elég volt, hiszen ebben az esetben  $\mathbf{A} * \mathbf{A}$  reguláris,  $\text{cond}(\mathbf{A} * \mathbf{A}) = 1,91$ , tehát a rendszer egyáltalán nem rosszul kondicionált. A felbontással kapott görbék alapján számított aktivitások, pontosabban az egyes gamma vonalakhoz tartozó beütésszámok külön-külön, és a referenciaértékek láthatók a III.1. táblázatban.

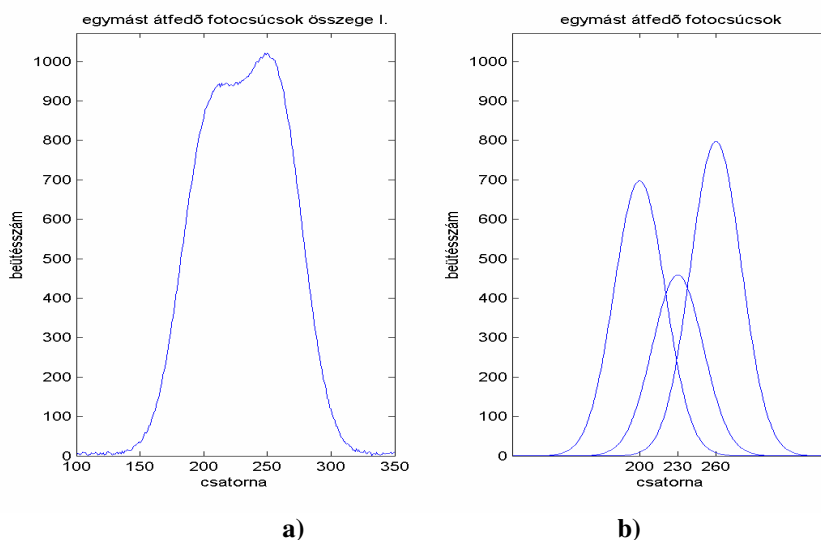
Egzakt pozíciók	$x_j = 90$	$x_j = 140$	$x_j = 200$	$x_j = 250$	$x_j = 300$	$x_j = 400$	Teljes beütésszám
generált spektrum	23999	39998	59997	19999	79995	71996	295980
felbontással kapott spektrum	25182	40474	60515	20443	80591	70754	298360
relatív eltérés (%)	4,92	1,19	0,86	2,20	0,74	1,7	0,80

**III.1. táblázat. A számított beütésszámok és az egzakt értékek, valamint ezek relatív eltérése**

Ugyanazt tapasztaljuk, mint a dekonvolúció esetében, azoknak a csúcsoknak az esetében nagyobb a hiba, amelyek részben vagy egészben el vannak fedve intenzívebb csúcsok által. A többi csúcs esetében 1% nagyságrendű a csúcsterület meghatározásának pontossága.

A III.1. ábra spektruma azonban jól láthatóan felbomlik Gauss-görbékre még akkor is, ha van közöttük láthatatlan és részben elfedett komponens. Vessük be azonban a kidolgozott apparátust sokkal élesebb helyzetekben, amikor ránézésre nem látszik szinte semmi részlet a spektrumból, csak annyit enged sejtetni a látvány, hogy esetleg 2 foto-csúcs olvad össze, de semmiképpen sem válik külön.

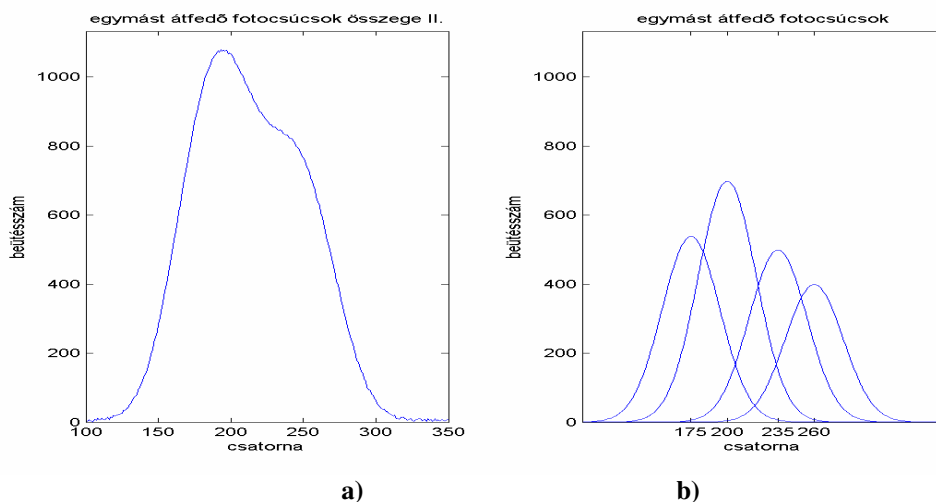
Ilyen zajos spektrumok láthatóak a III.2. a) és III.3. a) ábrákon, nevezzük ezeket I. és II. spektrumnak. Ugyanezen ábrák b) részén láthatóak azok a foto-csúcsok, amelyek összegeként az a) ábra előáll. Ezeket az összetett görbéket nyilván nem lehet ránézésre felbontani a b) ábra görbéire, de kiderül, hogy még egyes dekonvolúciós módszereknek is „meggyűlik a baja” ezekkel a spektrumokkal.



**III.2. ábra. Átfedő teljes energia csúcsokból álló spektrum (I.)**

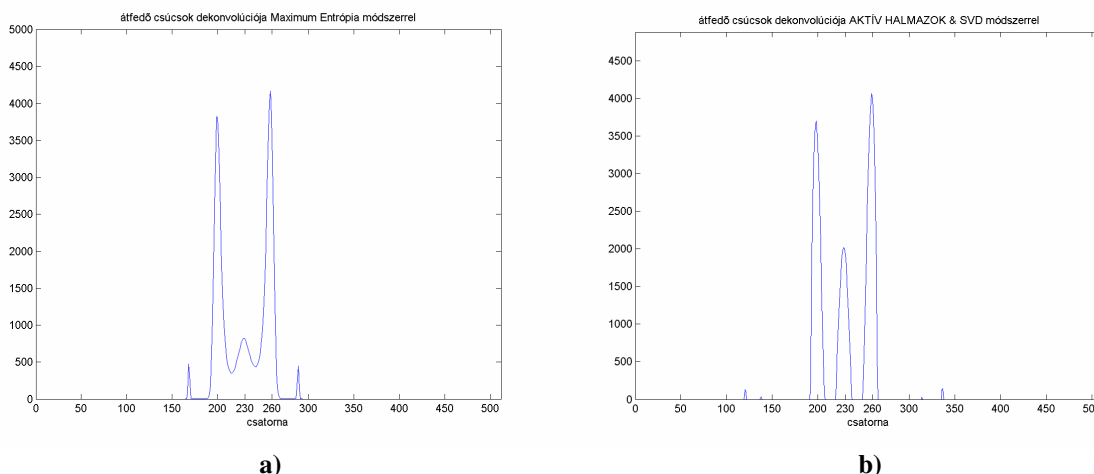
Mielőtt tovább lépünk, hangsúlyozzuk, hogy az ábrákon a vízszintes tengelynek csak az adott esetben lényeges tartományát ábráztuk, hogy a lényeg jól látható legyen, másrészt a b) ábrákon megjelöltük a fotocsúcsok középértékét.

Ahogy a III.1. ábra spektruma esetén, először is egy alkalmas dekonvolúciós módszerrel szét kell bontanunk a multipletteket különálló Gauss görbékre és meg kell határoznunk a Gauss eloszlások centrumát. Összehasonlításuképpen két módszert mutatok be, egyrészt azt, amelyik a legjobb felbontásúnak és leggyorsabb konvergenciájúnak mutatkozott, ez az aktív halmazok módszere a szinguláris felbontással párosítva, másrészt pedig a szakirodalomban nagyon gyakran emlegetett és alkalmazott maximum entrópia módszert.



**III.3. ábra. Átfedő teljes energia csúcsokból álló spektrum (II.)**

A III.4. ábrán látható az I. multiplett dekonvolúciójának eredménye. Az a) ábrán a MEM alkalmazásával a b) ábrán pedig az aktív halmazok módszerével kapott megoldást látjuk.



**III.4. ábra. Az I. multiplett dekonvolúciója a) MEM algoritmussal, b) Aktív halmazok és szinguláris felbontás együttes alkalmazásával**

Maximum Entrópia Módszer				
lépésszám	időtartam	1. poz.	2. poz.	3. poz.
15000	888,9s	201,05	229,21	256,31
Aktív halmazok módszere & Szinguláris felbontás				
lépésszám	időtartam	1. poz.	2. poz.	3. poz.
300	72,5s	199,43	228,60	257,5

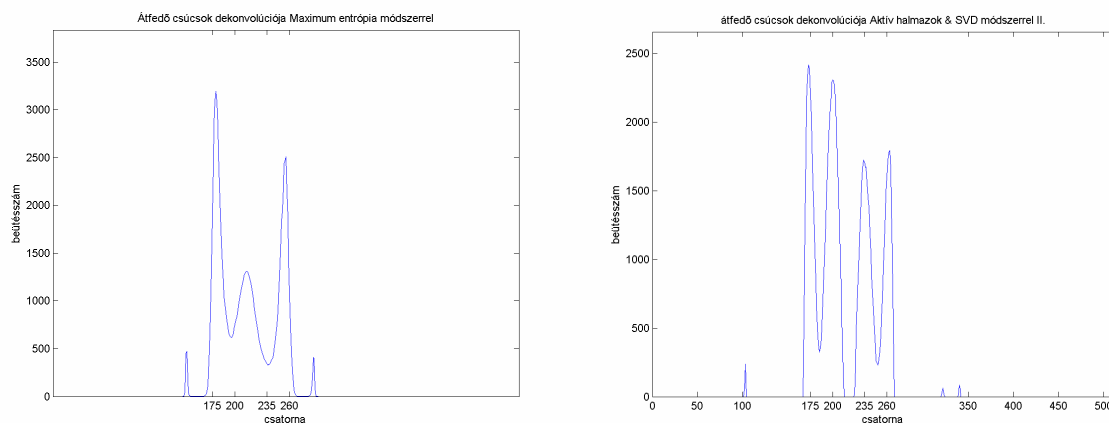
**III.2. táblázat. Az I. multiplett dekonvolúcióinak iterációs adatai és a megoldásokból számított pozíciók**

Azon túl, hogy szemléletesen is sokkal karakterisztikusabban adódnak a csúcsok a b) ábrán – ha eltekintünk az a) ábrán előállt két hamis csúcstól is – igen sokatmondóak a III.2. táblázat adatai, amelyek a két iteráció és a megoldások adatait tartalmazzák.

Szeretnék rámutatni arra, hogy a szakirodalomban [69-73] igen hatékony eljárásként alkalmazott MEM algoritmus alkalmazásához 50-szer annyi lépés és nagyjából 10-szer annyi idő

szükséges, azzal együtt, hogy az iteráció időtartamát a ritka mátrixok alkalmazásával a felére csökkentettük. Az aktív halmazok módszere sokkal jobb felbontású, ez a III.4. b) ábrán jól látszik, a csúcsok pozíciói pedig nagyságrendileg azonos hibával adódnak.

Végezzük most el ugyanezeket a számításokat a III.3. ábra négy csúcsból álló multipliettjére. A dekonvolúciós iterációk eredménye a III.5. a) és b) ábrákon látható.



a) **III.5. ábra. A II. multipliett dekonvolúciója a) MEM algoritmussal, b) Aktív halmazok és szinguláris felbontás együttes alkalmazásával**

Jól látható, hogy a MEM, ugyancsak 15000 lépés és 888,5s idő eltelte után sem képes felbontani a négy gamma vonalat, csak három csúcsot ad eredményül, és azok is rossz középértékeket szolgáltatnak amelyek rendre a következők: 180,0; 212,51 és 253,69. Ezek mind hamis értékek, vagy ha úgy tetszik minden csúcs esetén nagyon nagy a hiba, de mindenképpen elveszik egy csúcs. Ezzel szemben az aktív halmazok módszere a szinguláris felbontással most is karakteres csúcsokat szolgáltat, és megkapjuk mind a négy csúcsot. Tekintettel arra, hogy a csúcsok néhány csatornával közelebb vannak egymáshoz, mint a III.2. ábra multipliettjében, némileg több lépéses iterációra volt szükség, de a lépésszám így is mindössze 1000. Ezzel szemben a MEM algoritmus esetében hiába növeltük a lépések számát, az algoritmus nem szolgáltatja a hiányzó negyedik csúcsot. Az aktív halmazok módszerével kapott megoldás adatait tartalmazza a III.3. táblázat. Az egzakt pozíciók – amelyek leolvashatók pl. a III.3. b) ábráról – a következők: 175, 200, 235 és 280.

Aktív halmazok módszere & Szinguláris felbontás					
lépésszám	időtartam	1. poz.	2. poz.	3. poz.	4. poz.
1000	161,3s	176,61	199,43	235,93	258,52

III.3. táblázat. A II. multipliett dekonvolúciójának iterációs adatai és a megoldásból számított pozíciók

Meglepően nagy pontossággal adódnak az átfedő csúcsok centrumai. Ismét elmondhatjuk tehát, hogy az aktív halmazok módszere és a szinguláris felbontás alkalmazása igen hatékony eszköz az adott problémakörben.

De térjünk rá az ebben a pontban felvetett probléma megoldására az adott multiplettek esetében, vagyis határozzuk meg az egyes fotocúcsokhoz tartozó aktivitásokat vagy beütésszámokat. A Gauss-féle normálegyenlet megoldása a III.4. és III.5. táblázatban található értékeket szolgáltatja rendre az I. és II. multiplett esetében. Mindkét esetben az aktív halmazok módszere által szolgáltatott eredményeket vettük alapul.

Egzakt pozíciók	$x_j = 200$	$x_j = 230$	$x_j = 260$	Teljes beütésszám
generált spektrum	35000	23000	40000	98000
felbontással kapott spektrum	35073	21029	42181	98282
relatív eltérés (%)	0,21	8,57	5,45	0,28

III.4. táblázat. A számított beütésszámok és az egzakt értékek, valamint ezek relatív eltérése az I. multiplett esetében

Egzakt pozíciók	$x_j = 200$	$x_j = 230$	$x_j = 260$	$x_j = 260$	Teljes beütésszám
generált spektrum	27000	35000	25000	20000	107000
felbontással kapott spektrum	27611	33669	26224	19274	106780
relatív eltérés (%)	2,26	3,80	4,89	3,63	0,20

III.5. táblázat. A számított beütésszámok és az egzakt értékek, valamint ezek relatív eltérése a II. multiplett esetében

A legnagyobb hiba az aktivitás számítása során is azoknál a csúcsoknál mutatkozik, amelyek intenzív gamma vonalak által fedésben vannak, de még ezeknél is 10% alatt marad. A módszerek látványos tesztje nyilvánvalóan a teljes beütésszámokra adott eredménnyel elvégezhető. Ez minden esetben 1%-on belüli, tehát ez elfogadható eredmény.

Természetesen egy gamma spektrum nem kizárólag Gauss-görbékből áll. Felmerül a kérdés, hogyan számítunk aktivitást ha csak a nettó csúcsterületeket ismerjük. Erre a válasz a következő: a detektor egyik legfontosabb jellemzője a nettó csúcsterületnek az összes területhez viszonyított aránya, a „csúcs per összes” arány. Ezt a függvényt kalibráló izotópok segítségével meg kell határozni. Az V. pontban részletesen foglalkozom ennek a függvénynek a paraméterillesztésével is. Ezen függvény birtokában pedig a teljes beütésszám a nettó csúcsterület ismeretében már adódik.

### III.2. A MAXIMUM-LIKELIHOOD BECSLÉS ALKALMAZÁSA AKTIVITÁS-BECSLÉSRE ÖSSZETETT SPEKTRUMOK ESETÉN

Ebben a pontban azzal az esettel foglalkozom, amikor a fotocúcsok nem lokalizálódnak egy viszonylag szűk tartományra, így nem választható ki a spektrumnak olyan részlete, amely kizárólag teljes energia csúcsokat tartalmaz. Mint alább kiderül, a maximum likelihood becslés

[55,62-65] – amely egy dekonvolúciós módszernek is az alapja (II.4. pont), és amely a valószínűségelmélet igen hatékony apparátusa – igen eredményesen alkalmazható aktivitás számítására is – rekurzív környezetben –, nem követeli meg azt a specialitást, amit a III.1. pontban feltételeztünk.

Már itt hangsúlyozom, hogy a módszer alkalmazása feltételezi az R válasz mátrix ismeretét. Pontosabban, az alábbiakban közölt algoritmus feltételezi, hogy ismerjük a válasz mátrix minden egyes energia intervallumhoz tartozó oszlopát illetve sorát. A válasz mátrix előállítására az V. pontban megadok egy eljárást, amely eljárás ennek a pontnak a tartalmától teljesen független. Előrevetítem tehát az V. pont tartalmát, de úgy gondolom, hogy a címben megfogalmazott kérdés vizsgálata, tárgyát tekintve – tekintettel arra, hogy a dekonvolúció alkalmazásáról van szó – ebbe a pontba illik.

Tegyük fel ugyanazt, mint a III.1. pontban, hogy P db fotocsúcs van a spektrumban, ami természetesen ez nem jelenti azt, hogy P db különböző izotóp sugároz, az eljárás a beütésszámot ilyenkor nem izotópszelektív módon, hanem gamma vonalanként adja. Kérdés az  $N_p$  ( $p = 1, 2, \dots, P$ ) teljes beütésszám, tehát nem korlátozódunk a teljes energia csúcsokra. Egy izotóp esetében, amely több különböző energián sugároz, az aktivitás nyilván az egyes fotocsúcsokhoz kapott  $N_p$  beütésszámok összegzésével számítható. Tegyük fel továbbá, hogy a szórás ismert (ez az adat a szórás-kalibráció során adódik, amely kérdéssel az V. fejezetben szintén részletesen foglalkozom), és a csúcsok helyét már meghatároztuk dekonvolúcióval, tehát a  $\sigma_p$  és  $m_p$  ( $p = 1, 2, \dots, P$ ) konstansok adóttak.

Tegyük fel, hogy egy izotóp adott energiájú sugárzására, a p-edik Dirac-impulzusra, a detektorban  $N_p \cdot R_{pj}$  ( $j = 1, 2, \dots, m$ ) a válasz, ahol  $R_{pj}$  a válasz mátrix p-edik sora. Világos, hogy ez nem más, mint az egységnyi aktivitású izotóp esetén egységnyi idő alatt létrehozott spektrum, és  $N_p$  a keresett beütésszám. (Az aktivitás és a beütésszám közötti kapcsolat a határfok kalibrációval történik, de mivel ez egy megoldott probléma, én ezt a kérdést nem részletezem.)

P db izotópot illetve fotocsúcsot felételezve innen világos, hogy a j-edik csatornában a beütésszám várható értéke:

$$\lambda_j = \sum_{p=1}^P N_p R_{pj} \quad (3.3)$$

Az ML-beclést alkalmazva szerkesszük meg a probléma Likelihood függvényét. Tekintettel arra, hogy a j-edik csatornában a beütésszám Poisson-eloszlást követ [55], annak valószínűsége, hogy a j-edik csatornában a beütések száma  $y_j$  a következő:

$$P(y_j) = \frac{\lambda_j^{y_j}}{(y_j)!} \cdot \exp(-\lambda_j) \quad (3.4)$$



Ha tehát  $N_p$  jelöli a  $p$ -edik csatornában a beütésszámot ( $p = 1, 2, \dots, P$ ) akkor figyelembe véve a (3.3) és (3.4) összefüggéseket, a Likelihood függvény a következő alakot ölti:

$$L(N_1, \dots, N_P) = \prod_{j=1}^m \frac{\left( \sum_{p=1}^P N_p \cdot R_{pj} \right)^{y_j}}{(y_j)!} \cdot \exp\left( - \sum_{p=1}^P N_p \cdot R_{pj} \right) \quad (3.5)$$

ebből adódik a log-likelihood függvény:

$$\ln L(N_1, \dots, N_P) = \sum_{j=1}^m \left( y_j \left( \ln \left[ \sum_{p=1}^P N_p \cdot R_{pj} \right] \right) - \sum_{p=1}^P N_p \cdot R_{pj} - \ln(y_j)! \right) \quad (3.6)$$

Az ismeretlen  $N_p$  paraméterekre a megoldást a  $\frac{\partial \ln L(N_1, \dots, N_P)}{\partial N_r} = 0, r = 1, 2, \dots, P$  Likelihood-egyenletek szolgáltatják. Ezek megoldása a következő:

$$\sum_{j=1}^m \left( \frac{y_j \cdot R_{rj}}{\sum_{p=1}^P N_p \cdot R_{pj}} - R_{rj} \right) = 0; (r = 1, 2, \dots, P) \quad (3.7)$$

Ez egy  $P$  db egyenletből álló és  $P$  db ismeretlent tartalmazó egyenletrendszer az  $N_p$  ismeretlenekre. A rendszer egyetlen „hibája”, hogy **nemlineáris** az  $N_p$  ismeretlenekre. Azonban iterációval megoldjuk az alábbi módon. Legyen az  $N$  nulladik közelítése  $N^{(0)} = (1, 1, \dots, 1)$ , majd ha ismertnek tételezzük fel  $N^{(k)}$ -t, akkor a nevezőben levő összegre vezessük be az

$S_j^{(k)} = \sum_{p=1}^P N_p^{(k)} R_{pj}$  egyszerűsítő jelölést, és rendezzük át az egyenletrendszert az alábbi módon:

$$\sum_{p=1}^P N_p^{(k+1)} \left( \sum_{j=1}^m \frac{R_{pj} \cdot R_{rj}}{S_j^{(k)}} \right) = \sum_{j=1}^m \frac{y_j R_{rj}}{S_j^{(k)}} \quad (3.8)$$

Ezen formula szerint a rendszer igen rövid idő alatt megoldható. A tapasztalat szerint az iteráció már 2–4 lépésben eredményt ad, és ehhez időben mindössze a másodperc tört része szükséges. Alkalmazzuk ezt az iterációt tehát a III.1. ábra multipliettjére. Az eredményeket a III.6. táblázat tartalmazza.

	$x_j = 90$	$x_j = 140$	$x_j = 200$	$x_j = 250$	$x_j = 300$	$x_j = 400$	Teljes beütésszám
generált spektrum	23999	39998	59997	19999	79995	71996	295980
felbontással kapott spektrum	25229	40319	60579	20414	80742	71407	299690
relatív eltérés (%)	5,12	0,80	0,97	2,07	0,93	0,81	1,25

III.6. táblázat. Az összetett spektrum felbontása maximum likelihood elv, a III.8. iteráció felhasználásával

Lényegében hasonló nagyságrendű hibával kaptuk a beütésszámokat, mint a direkt görbeillesztés alkalmazásával, egyetlen kirívó eset a legkisebb energiájú csúcs esetén az eltérés. De ne feledjük, hogy a módszer sokkal általánosabb körülmények között is alkalmazható, amikor a III.1. pont módszere teljesen alkalmatlan, ennek nyilván az az ára, hogy helyenként pontatlanabb. Arról sem szabad megfeledkeznünk, hogy az általánosságoknak van még egy hátránya. Nevezetesen az, hogy itt szó sincs görbeillesztésről, nem kapjuk meg a spektrum alakját leíró függvény paramétereit, csak a beütésszámokat, azokat viszont a teljes spektrumra vonatkozólag. Pontosabban – mint az V. pontból visszatekintve kiderül –, megkapjuk a válasz mátrix oszlopainak konstansszorosait.

Tesztelésképpen végezzük most el a III.1. pont I. és II. multipléttjére (III.2. és III.3. ábra) vonatkozólag az aktivitásszámítást a maximum likelihood elv alkalmazásával. Az eredmények a III.7. és III.8. táblázatokban vannak összefoglalva.

Egzakt pozíciók	$x_j = 200$	$x_j = 230$	$x_j = 260$	Teljes beütésszám
generált spektrum	35000	23000	40000	98000
felbontással kapott spektrum	35212	20108	43751	99072
relatív eltérés (%)	0,60	12,57	9,37	1,09

**III.7. táblázat.** A ML-elv alapján számított beütésszámok és az egzakt értékek, valamint ezek relatív eltérése az I. multiplétt esetében

Egzakt pozíciók	$x_j = 200$	$x_j = 230$	$x_j = 260$	$x_j = 260$	Teljes beütésszám
generált spektrum	27000	35000	25000	20000	107000
felbontással kapott spektrum	29592	32546	25375	20701	108210
relatív eltérés (%)	9,60	7,01	1,50	3,50	1,13

**III.8. táblázat.** A ML-elv alapján számított beütésszámok és az egzakt értékek, valamint ezek relatív eltérése a II. multiplétt esetében

Ismét világosan látszik, hogy a ML elven alapuló számítás nagyobb pontatlansággal adja a beütésszámokat, mint a legkisebb négyzetek feladatának megoldása, és szintén szembeeszkő, hogy a részben vagy egészen elfedett csúcsok esetén a legjelentősebb a hiba.

### III.3. ÖSSZEGZETT KÖVETKEZTETÉSEK

A szcintillációs spektroszkópiában köztudottan az egyik legfontosabb feladat – az izotópok azonosítása után – az egyes sugárzó izotópok aktivitásának meghatározása abban az esetben amikor a mért spektrum egyszerre több izotóp spektrumának összege. A detektor rossz felbontása következtében problémát jelent az izotópok spektrumának szétválasztása. A III.

fejezetben leírtam két olyan algoritmust, amelyek egy alkalmas **dekonvolúciós algoritmus lefuttatása után** lehetővé teszik az aktivitás meghatározását. Az első esetben a Gauss-féle normálegyenletre alapozott iteráció szolgáltatja a nettó csúcsterületeket, ebben az esetben grafikusan is adódnak a megoldások Gauss görbék formájában. A második általánosabb esetben, amikor feltételezzük a válasz mátrix ismeretét – ami nyilván nem extra kívánság, hiszen ennek hiányában a dekonvolúció sem végezhető el –, egy nemlineáris iteráció teszi lehetővé, hogy numerikusan szétválasszuk az egyes izotópok gamma vonalaihoz tartozó beütésszámokat. Ebben az esetben nem kapunk analitikus megoldásokat, de a válasz mátrix sorainak megfelelő függvények” valós számszorosait tekinthetjük grafikus megoldásnak is. A két részletezett algoritmus eredményes alkalmazása a II. fejezetben tárgyalt dekonvolúciós módszerekkel kapott eredményeknek. Azok hiányában egyik eljárás sem alkalmazható. A III. fejezetben az is kiderült, hogy II. pontban általam leírt algoritmusok nagyobb pontosságú, jobb felbontású módszerek mint a szakirodalmi módszerek [30-35], pontos eredményt szolgáltatnak átfedő, eltakart csúcsok esetén is, amikor a hagyományos eljárások csődöt mondanak.

## IV.FEJEZET: A ZAJSZÜRÉS LEHETŐSÉGÉNEK VIZSGÁLATA, A DISZKRÉT FOURIER-TRANSZFORMÁCIÓ ALKALMAZÁSA

A Fourier-transzformáció apparátusát [79-83] elsősorban idősorok analízisében, többek között frekvencia-spektrumok meghatározására, nagyfrekvenciás zaj szűrésére alkalmazzák [84-87]. Az értekezésben vizsgált gamma-spektrum természetesen nem idősor, így a hagyományos értelemben vett frekvenciaanalízisre nincs szükség, de a gamma spektrumot a véletlenszerű fluktuációknak, statisztikus ingadozásoknak köszönhetően ugyancsak terheli zaj. A II. és III. fejezetben minden algoritmus tesztelésénél egy-egy zajos spektrumot vizsgáltunk, amelyet a bevezető fejezetben generáltunk úgy, hogy egy ideális spektrumra ráültettünk egy kis amplitúdójú véletlen ingadozást. Ennek a zajnak az intenzitása kisebb volt, mint a csúcsok átlagos amplitúdójának 1%-a, de ahogyan azt láttuk, már ez a csekély zaj is lehetetlenné tette a dekonvolúciót közvetlen invertálással – mint ahogyan arra rámutattunk, ez az invertálás nem a hagyományos értelemben veendő, hanem a szinguláris felbontáson alapul –. Ezért volt szükség számos iterációs algoritmus kidolgozására és vizsgálatára a II. fejezetben. A bevezetőben arra is utaltunk, hogy nem szükséges a zaj intenzitását nagyságrendekkel növelni – az alkalmazott kis intenzitású zaj jelenléte is rámutatott a matematikai nehézségekre –, mert lehetőség van a zaj amplitúdójának csökkentésére, a zaj kiszűrésére. Ennek a kérdésnek a vizsgálatát végezzük el ebben a fejezetben. Mellékeredményként adódik egy klasszikus analitikai módszer a csúcskeresésre, amely azonban ebben a témakörben nem igazán hatékony, de leírjuk és kódoljuk, mert előfordulhat, hogy más fizikai problémák megoldása során hasonló matematikai gondok adódnak, és a módszer hatékony lehet.

A zajsűrés lehetősége a konvolúció fogalmán alapul. A konvolúció alkalmazható önmagában és a Fourier-transzformáció fogalomkörén belül is, mi röviden mindkettőt tárgyaljuk. A konvolúciót lehet értelmezni folytonos függvényekre is, de a spektrumok vizsgálatánál, ahol a spektrumot, mint függvényt  $n$  db diszkrét pontban ismerjük, magától értetődőbb a konvolúció és hasonlóan a Fourier-transzformáció diszkrét változatának alkalmazása.

### IV.1. ZAJSZÜRÉS KONVOLÚCIÓVAL

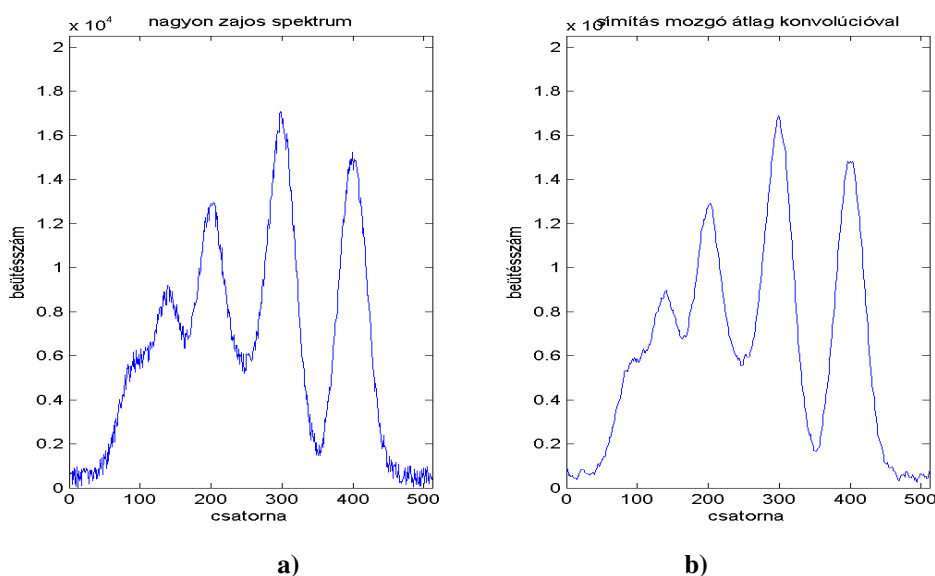
A zajsűrés alap gondolata az átlagolás [84,87]. Átlagoljuk ki a szomszédos  $k$  tartományban levő spektrumkomponenseket, ezáltal csökkentjük a fluktuációkat. Az átlagolás legegyszerűbben egy diszkrét valószínűség eloszlással oldható meg. Ennek több változata ismert:

1. **Mozgóátlag szűrőnek** nevezzük a  $g$  vektort, ha minden komponense ugyanaz a konstans, tehát diszkrét egyenletes eloszlással van dolgunk, ekkor tehát  $g_j = 1/k = 1/(2p + 1)$ . Ez a szűrő egyszerűen annyit tesz, hogy a szomszédos  $k$  db koordinátának képezi az egyszerű

matematikai átlagát. Ez alól kivételt képez a két végén levő p-p db komponens – amire már utaltunk –, ha p nagy, akkor célszerű ezt a p db koordinátát a szomszédos p db komponens átlagával helyettesíteni, ugyanis a dekonvolúciós algoritmusok az aszimmetriából adódó eltérést, „lehajlást”, csúcsként értelmezhetik. Ez a szűrő egy durva simításra nagyon jól alkalmazható, „finomhangolásra” azonban célszerűbb egy jól megválasztott súlyozott átlag.

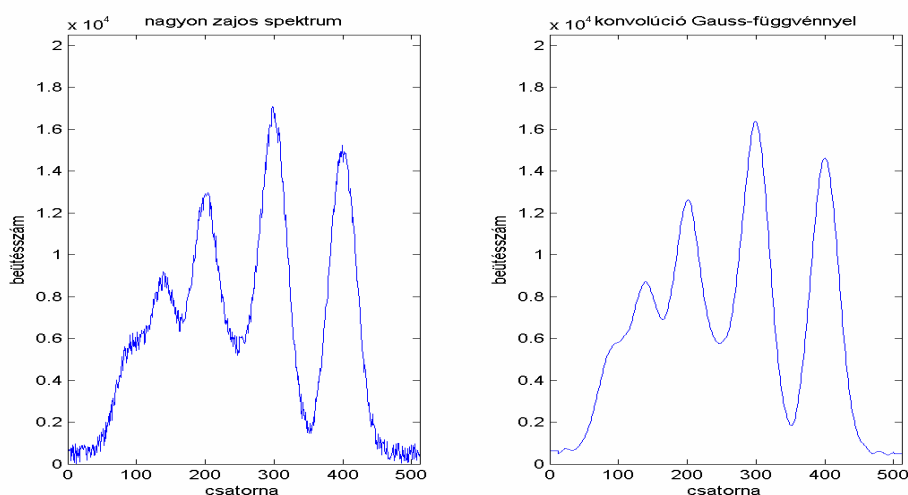
2. A legprecízebb eszköz a zajszűrésre a **normális eloszlás**, pontosabban egy standard normális eloszlású valószínűségi változó sűrűségfüggvényének diszkrét helyeken vett értékeiből álló vektor. Ez azért nagyon hatékony eszköz, mert „hangolható” azaz megválasztható úgy a szórása, hogy egy előírt frekvenciánál nagyobb frekvenciákat mind kiszűrjön. (Már most megjegyezzük, hogy mivel csak véges sok pontot veszünk figyelembe a számítások során, az említett művelet egzaktul nem hajtható végre, de a gyakorlat számára ez kielégítő pontosságot jelent, annál is inkább, mivel nem tehetünk mást!)

Annak érdekében, hogy a simítás következményeit szemléletessé tegyük, mindenekelőtt egészítsük ki az I.2. ábra ideális spektrumát egy az I.5.a) ábrán szemléltetett zajnál ötvenszer nagyobb amplitúdójú zajjal, azaz legyen a zavar amplitúdója most 1000 egység. Vizsgáljuk meg, mi az eredménye a zajszűrésnek. A IV.3. a) ábrán látható ez a „nagyon zajos” spektrum, a b) ábrán pedig egy 5 egység hosszúságú ( $k = 5$ ) mozgóátlag-szűrővel végzett konvolúció.



IV.3. ábra. Nagyon zajos spektrum simítása mozgóátlag szűrővel,  $k = 5$  esetén

A IV.4. ábrán ugyanennek a spektrumnak a simítása látható  $\sigma = 4$  egységnyi szórású Gauss-függvénnyel. Az eredmény láthatóan jobb, de vizuálisan hasonló eredmény elérhető mozgóátlag szűrővel is, ha a  $g$  vektor elemszámát megnöveljük. Például  $k = 15$  esetén már alig tapasztalható különbség a két konvolúció eredménye között.



**IV.4. ábra. Zajsűrés Gauss-függvénnyel**

Annak érdekében, hogy számszerűvé tegyük a konvolúció hatását, különböző  $k$  és  $\sigma$  értékek esetén kiszámítottuk az eredeti zajtalan és a zajsűréssel kapott spektrumok különbségének maximum-normáját, vagyis az eltérések abszolút értékének maximumát:

Mozgóátlag:  $k = 5, 10, 15$  esetén rendre: 377,12; 373,51; 369,28;

Gauss:  $\sigma = 3, 4, 5$  esetén rendre: 273,98; 285,97; 344,60.

A következtetésünk nagyjából annyi, hogy nincs lényeges nagyságrendi különbség a zajsűréssel kapott spektrumok minőségében, az egyszerű átlagolás is meglepően jó eredményt ad. Ami talán lényeges különbség, hogy a mozgó átlag annál pontosabb eredményt ad minél több elemű a  $\mathbf{g}$  vektor ennek azonban az a következménye, hogy a spektrum két végén egyre több komponensből kell eltekintenünk, mert értékük gyakorlatilag semmitmondó. Ezzel szemben a Gauss-konvolúció annál pontosabb minél kisebb a szórás, azonban nem szabad minden határon túl csökkenteni a szórást, mert ebben az esetben nem történik meg maga a szűrés, hiszen ha  $\sigma$  nagyon kicsi, túl kevés elemű a  $\mathbf{g}$  vektor és nincs tényleges átlagolás. Ennek a kérdésnek a jóval részletesebb vizsgálatára rátérünk a következő pontban, ahol spektrumok dekonvolúciójával kapcsolatosan vizsgáljuk meg a zajsűrés lehetőségét.

A zajsűrés és a „frekvenciahangolás” lehetősége és oka világosabban látható, ha a diszkrét Fourier-transzformációt alkalmazzuk. Ez következik a IV.2. pontban.

## IV.2. ZAJSZŰRÉS DISZKRÉT FOURIER-TRANSZFORMÁCIÓVAL

Egy  $n$  db pontban ismert  $y(p)$  függvény  $F[y(p)] = Y(k)$ -val jelölt diszkrét Fourier-transzformáltját [81, 84] (a továbbiakban DFT) a következő formula definiálja:

$$Y(k) = \sum_{p=1}^n y(p) \exp\left(-i \cdot 2\pi \cdot \frac{kp}{n}\right) \quad (4.1)$$

ahol  $i$  az imaginárius egység. (Ezért alkalmaztuk a szokatlan  $p$  jelet az indexelésre. Kiemeljük továbbá, hogy a gyakorlatban szokásosabb a szummában a 0-tól  $n - 1$ -ig tartó indexelés, de mivel egyrészt a komplex exponenciális függvény periodikus, másrészt az eddigiekben nem használtuk a 0 indexet, célszerűbben találtuk az alkalmazott jelölést.)

Ebben az esetben az  $F^{-1}[\mathbf{Y}(k)]$  inverz transzformáció az

$$y(p) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n Y(k) \exp\left(i \cdot 2\pi \cdot \frac{kp}{n}\right) \quad (4.2)$$

formulával számítható. Ha bevezetjük a témakörben szokásos  $w = \exp(-i \cdot 2\pi/n)$  jelölést, akkor a transzformáció-pár az alábbi egyszerű alakban adható meg:

$$\text{analízis: } Y(k) = \sum_{p=1}^n y(p) \cdot w^{kp}; \quad \text{szintézis: } y(p) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n Y(k) \cdot w^{-kp}; \quad (4.3)$$

Innen pedig világos, hogy a (4.3) formulák egy-egy mátrixszorzással egyenértékűek. Vezessük be a  $\mathbf{W} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$  mátrixot a  $\mathbf{W}(p, k) = w^{(p-1) \cdot (k-1)}$  definícióval. Ekkor a transzformáció és az inverz transzformáció egyszerűen formalizálható rendre az alábbi módon:  $\mathbf{Y} = \mathbf{W}\mathbf{y}$ ;  $\mathbf{y} = (1/n)\mathbf{W}^*\mathbf{Y}$ , ahol  $\mathbf{W}^*$  – tekintettel arra, hogy komplex elemű mátrixról van szó –, nem egyszerűen a transzponált mátrix, mint eddig, hanem az adjungált mátrix, azaz a transzponált konjugáltja.

Itt a Fourier-transzformáció jelen alkalmazások szempontjából egyetlen fontos tulajdonságát emeljük ki, amely a konvolúció transzformáltjára vonatkozik. Az alkalmazott konvolúció-tétel úgy hangzik, hogy a konvolúció transzformáltja egyenlő a transzformáltak szorzatával, azaz formulákkal kifejezve:

$$F[\mathbf{h}] = F[\mathbf{f} * \mathbf{g}] = F[\mathbf{f}] \cdot F[\mathbf{g}] \quad (4.4)$$

Ha ennek felhasználásával szeretnénk konvolúciót számítani, akkor alkalmazzuk (4.4) fordítottját, tehát a

$$\mathbf{h} = \mathbf{f} * \mathbf{g} = F^{-1}[F[\mathbf{f}] \cdot F[\mathbf{g}]]; \quad (4.5)$$

azonosságot, vagyis először képezzük a transzformáltakat, majd ezek szorzatának képezzük az inverz transzformáltját.

Az alkalmazás szempontjából fontos tény, hogy egy Gauss-függvény Fourier-transzformáltja ugyancsak Gauss függvény, annyi a lényeges különbség, hogy a transzformált szórása az eredeti függvény szórásának reciproka:

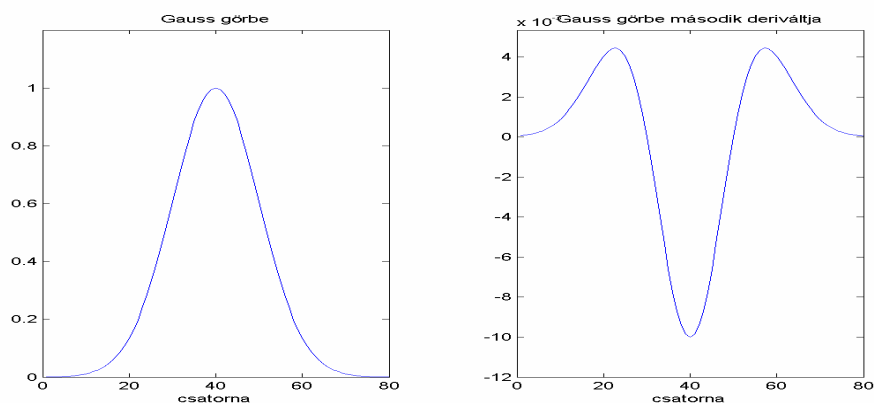
$$F\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma} \cdot \exp\left(-\frac{t^2}{2\sigma^2}\right)\right] = \exp\left(-\frac{\omega^2 \sigma^2}{2}\right) \quad (4.6)$$

(Ahol a szokásnak megfelelően  $t$  az eredeti függvény változójaként az időt,  $\omega$  pedig a transzformált változójaként a frekvenciát jelöli.) Tartsuk szem előtt, hogy a transzformált szórása  $\sigma^* = 1/\sigma$ . Ez azt jelenti, hogy ha a spektrum konvolúcióját képezzük egy Gauss-függvénnyel,

akkor ez egyenértékű azzal, hogy a spektrum transzformáltjának képezzük a szorzatát ugyancsak egy alkalmasan megválasztott szórású Gauss-függvénnyel, majd a szorzatnak képezzük az inverz transzformáltját.

### IV.3. CSÚCSKERESÉS MÁSODIK DERIVÁLTAKKAL

A Fourier-transzformációnak illetve a konvolúciónak van egy olyan következménye, amely esetenként alkalmas módszer lehet csúcskeresésre. Tekintsünk a IV.5. ábrára, ahol egy Gauss-függvényt és annak második deriváltját láthatjuk.



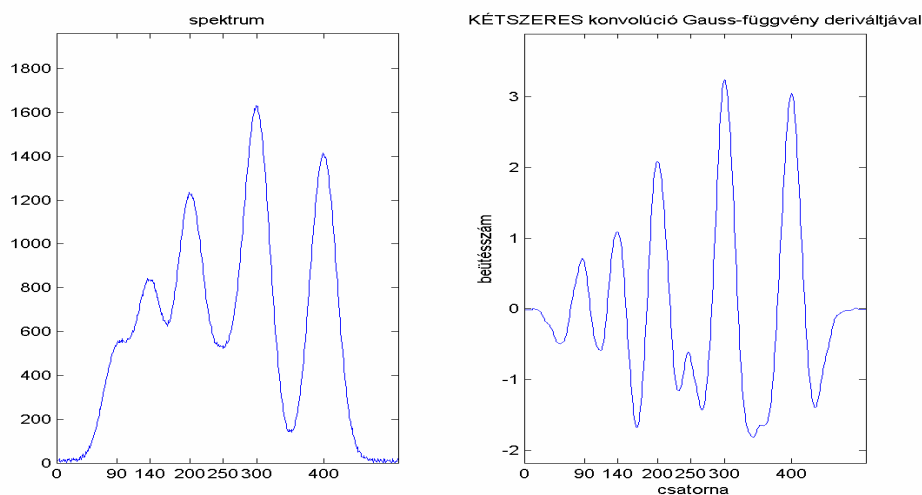
IV.5. ábra. Gauss-függvény és második deriváltja

Látható, hogy a második deriválnak éles minimuma van azon a helyen, ahol a függvénynek maximuma – és ez nyilvánvalóan teljesül minden konkáv függvényre is, nem szükséges feltétel, hogy a vizsgált függvény éppen egy Gauss-görbe legyen –. Ha tehát sikerülne adott esetben egy spektrum második deriváltját előállítani, akkor az eljárás alkalmas lehetne a fotocsúcsok helyének meghatározására. Mivel azonban a spektrum nem adható meg analitikusan, a deriválás műveletének elvégzése kizárt. A fluktuációk miatt a „fél-analitikus” módszer, az  $y_i - y_{i-1}$  különbségi hányadosok kiszámítása sem visz közelebb a célhoz, mert a szomszédos csatornatartalmak különbségében ugyanúgy megtalálható a fluktuációk hatása. További módszer lehet, hogy a spektrumra valamilyen függvényt, például polinomot illesztünk. Nem interpolációs polinomot, mert a zaj zavaró hatása ebben az esetben is érvényesül, hanem a legkisebb négyzetek módszerével illesztünk egy közelítő polinomot, de a tapasztalatok szerint ebben az esetben az eredmény nagyon érzékenyen függ attól, hogy hány pontra illesztettük a polinomot és attól, hogy az adott polinom hányad fokú. Így ez a módszer sem megbízható. Használjuk azonban ki a konvolúció alábbi tulajdonságát:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(f * g)(t) &= \frac{d}{dt} \left( \int_{-\infty}^{\infty} f(u) \cdot g(t-u) du \right) = \int_{-\infty}^{\infty} f(u) \cdot \frac{d}{dt}(g(t-u)) du \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(u) \cdot g'(t-u) du = (f * g')(t) \end{aligned} \quad (4.8)$$

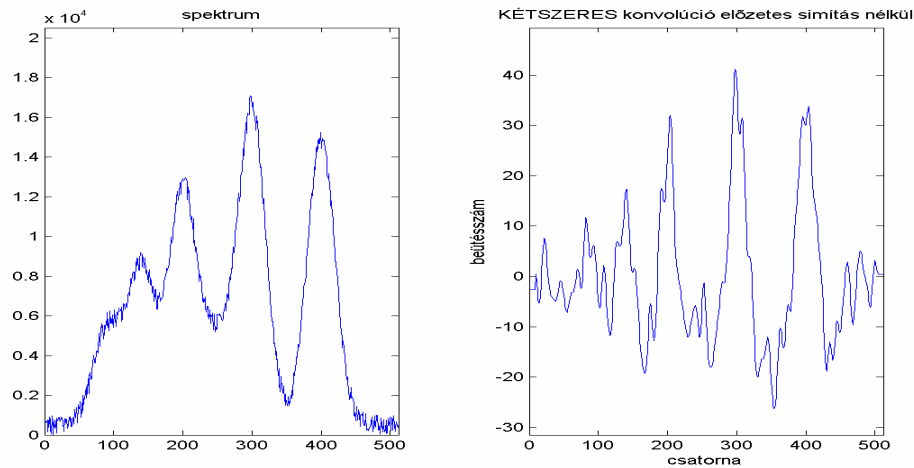


ami „jobbról-balra olvasva” úgy értelmezhető, hogy ha konvolúciót képezünk a  $g$  függvény deriváltjával, akkor az egyenlő a  $g$ -vel képezett konvolúció deriváltjával, másképpen fogalmazva a konvolúció és a deriválás sorrendje felcserélhető. Legyen most  $g$  a IV.2. pontban vizsgált Gauss-függvény. Már kiderült, hogy az  $f * g$  konvolúció egy simítást hajt végre a spektrumon. Ezt figyelembe véve a (4.8) formula alkalmazásával két legyet ütünk egy csapásra, ha a spektrumot konvolváljuk a Gauss-függvény deriváltjával, akkor egyszerre hajtunk végre simítást és deriválást. **Ezek után világos, hogy a második deriváltat úgy állítjuk elő, hogy a spektrumot – amelyet nagyon zajos esetben először simítjuk egy közönséges konvolúcióval – kétszer egymás után konvolváljuk a Gauss-függvény első deriváltjával.** Egyszerűbben szólva tehát a kétszeres konvolúció szolgáltatja a második deriváltat. Ezzel előállíthatjuk a kétszer – vagy háromszor – simított spektrum második deriváltját, amely szolgáltathatja a csúcshelyeket. A módszer nyilvánvaló hátránya, hogy alkalmazásával nem lehet a csúcsokat egyre szűkebbé tenni, mint a dekonvolúciós iterációk esetében, így hatékonysága, felbontása nem olyan fokú, de előfordulhatnak olyan esetek, amikor kiválóan működik. Ezért írtuk le az eljárást. Alkalmazzuk most a módszert a zajos spektrumokra. A világosabb összehasonlítás érdekében a következő ábrákon a második derivált  $(-1)$ -szeresét fogjuk ábrázolni. Az eddigiekben is többször vizsgált zajos spektrum és második deriváltja a IV.6. ábrán látható.



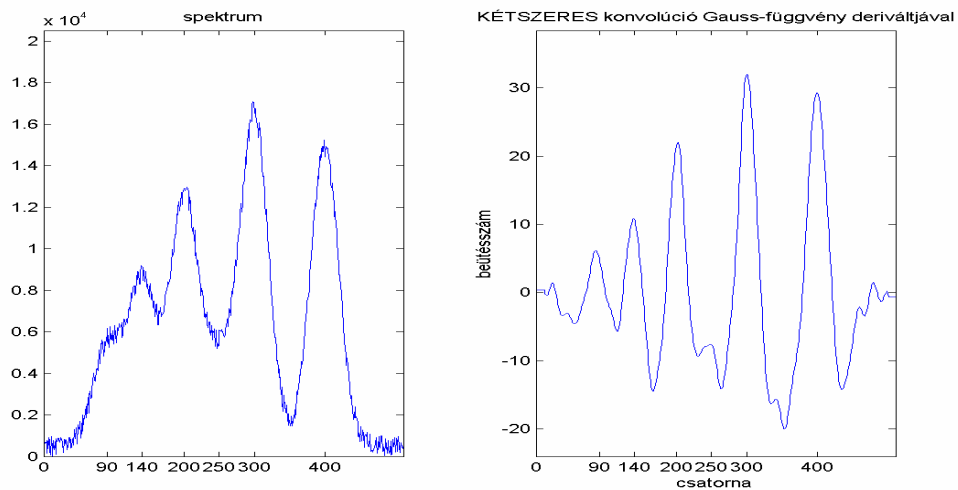
**IV.6. ábra. Zajos spektrum vizsgálata második deriváltakkal  
(a második derivált ellentettjét ábrázoltuk)**

Alacsony zajszint esetén, ha csúcsok elég távol vannak egymástól, a második deriváltak egészen pontosan adják a csúcsok helyét. Ha azonban a zaj amplitúdóját 50-szeresre emeljük, ahogyan a IV.1. pontban is tettük, a módszer hátrányai kezdenek megmutatkozni. Ha nem alkalmazunk a kétszeres konvolúció előtt egy zajszűrő simítást, akkor a IV.8. ábrán látható görbét kapjuk.



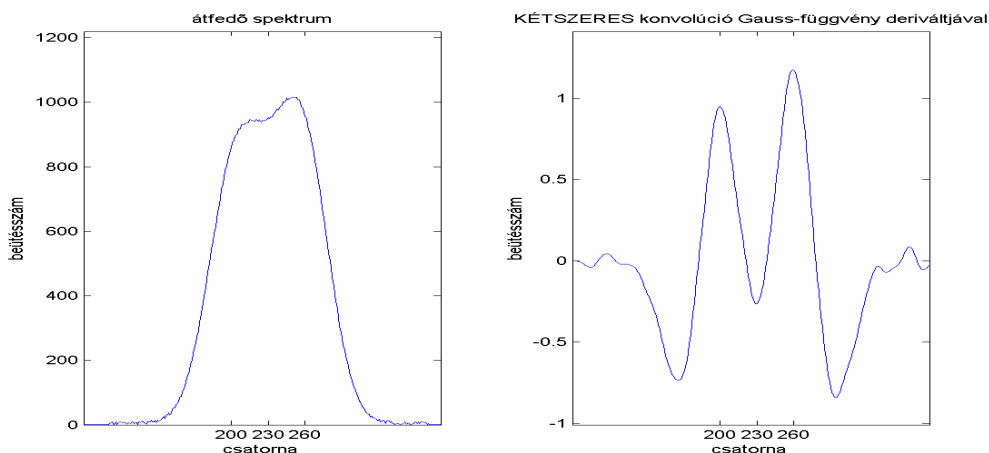
**IV.7. ábra. Nagyon zajos spektrum második deriváltja előzetes simítás nélkül**

Mint látható a második derivált is örökli a spektrum fluktuációit, számos hamis csúcsot kapunk, ez az eredmény tehát nem kielégítő. Ha azonban a nagyon zajos spektrumra alkalmazunk egy előzetes simítást, azaz egy konvolúciót Gauss-függvénnyel, akkor a IV.9. ábrán látható lényegesen jobb eredmény adódik.



**IV.8. ábra. Második derivált számítása előzetes simítással**

Bár a kapott eredmény lényegesen jobb, világosan látszik, hogy a  $j = 250$  pozíciójú csúcs nem adódik kellően karakteresen és a spektrum két végén és közepén is adódnak hamis csúcsok. Ha végül egy olyan spektrumra alkalmazzuk az eljárást, amelyben egymást nagymértékben átfedő, közeli csúcsok találhatóak (III.2. a) és b) ábra), akkor látható, hogy a módszer felbontóképessége igen gyenge. A IV.9. ábra alapján világos, hogy a 3db átfedő csúcs közül csak kettőt kapunk vissza, a  $j = 230$  pozícióhoz tartozó „középső” fotocsúcs a módszer alkalmazása során teljesen elveszik, és ezt a szűrőként alkalmazott Gauss-görbe szórásának változtatásával sem lehet kimutatni.



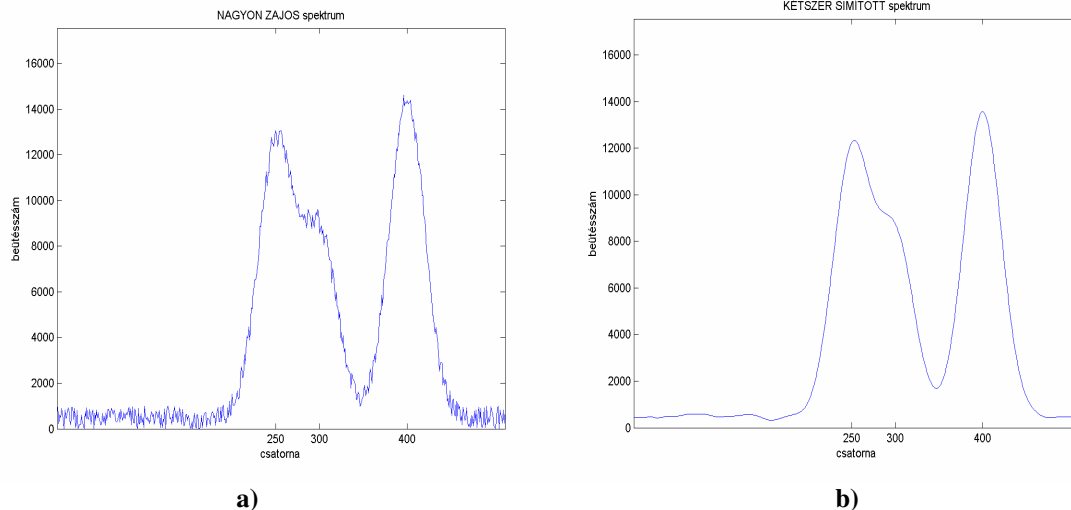
**IV.9. ábra. Közeli, átfedő csúcsok együttesének második deriváltja  
A középső csúcs a módszerrel nem mutatható ki**

A második deriváltakkal történő csúskeresés módszerére azért tértünk ki, mert a témakör szakirodalmában egy nagyon elismert monográfia a [4] kötet, melyben mindössze két eljárást említenek a szerzők a csúcsok maximumhelyének meghatározására, ez az egyik. Szerettünk volna rámutatni ezzel a vizsgálattal a módszer hiányosságaira és egyben rávilágítani a II. fejezetben tárgyalt dekonvolúciós algoritmusok értékeire és arra, hogy ezek a módszerek mennyire hiányoznak még a témakör szakirodalmából.

#### **IV.4. A DEKONVOLÚCIÓS ALGORITMUSOK ZAJRA VONATKOZÓ ÉRZÉKENYSÉGE, A ZAJSZÜRÉS LEHETŐSÉGÉNEK VIZSGÁLATA**

Ebben a pontban megvizsgáljuk, hogy a II. fejezetben vizsgált dekonvolúciós eljárások által adott megoldásokat mennyire befolyásolja a zaj jelenléte a spektrumban, továbbá tanulmányozzuk, hogy lehetőség van-e a zaj szűrésével az iterációs algoritmusok által adott megoldást javítani. Ehhez generálunk egy olyan spektrumot, amelyben vannak átfedő csúcsok,  $j = 250, 300$  és  $400$  pozícióknál és amelyre egy intenzív, a IV.2. ponthoz hasonlóan, a korábbiaknál 50-szer intenzívebb zajt ültetünk, melynek amplitúdója 1000. Annak érdekében, hogy a zajszűrés hatását megvizsgáljuk, ezt az intenzíven zajos spektrumot – tekintettel a zaj intenzitására – kétszer egymás után konvolváljuk egy Gauss-függvénnyel. Ezt a műveletet elvégezhetjük egyszerűen a (4.1) formula alkalmazásával, vagy a (4.3) formulák szerint DFT – inverz DFT kétszeri alkalmazásával is. Ez utóbbinál csak arra kell ügyelni, hogy ha a közvetlen konvolúciónál a Gauss-görbe szórása  $\sigma$ , akkor DFT alkalmazása esetén a „frekvencia” tartományban  $1/\sigma$  szórású függvénnyel szorzunk. Az eredmények között elvi különbség nincs.

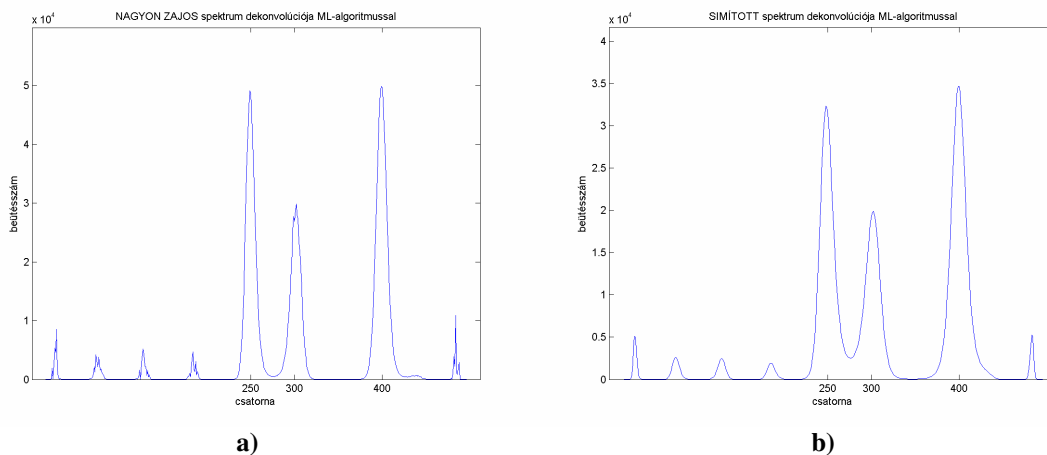
A IV.11. ábra a) és b) részén ábrázoltuk rendre a „nagyon zajos” spektrumot és a kétszeri simítással kapott spektrumot.



IV.11. ábra. a) Nagyon zajos, b) kétszeri konvolúcióval kapott simított spektrum

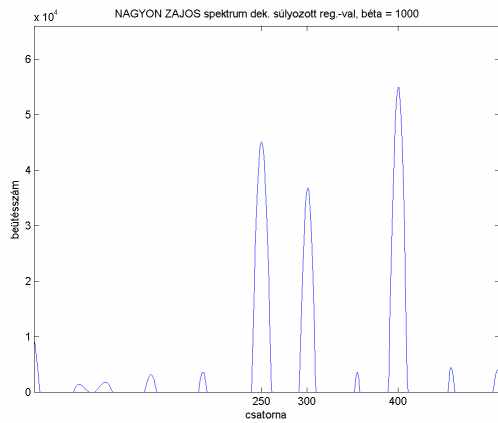
Alkalmazzunk most elvileg különböző alapokon nyugvó dekonvolúciós módszereket rendre az a) és b) pont spektrumára. Vizsgáljuk meg a zaj jelenlétének illetve kiszűrésének hatását, és hasonlítsuk össze az egyes módszereket. Mielőtt a vizsgálatokat elvégezzük, hogy az említett 3 csúcson kívül az a) ábrán látható spektrum kizárólag véletlenszám generátorral előállított, egyenletes valószínűség eloszlású zajt tartalmaz. A „zaj” fogalmával ismét csak a hibával terhelt, méréssel kapott spektrumot modellezzük. Ilyen módon figyelembe vesszük a mérés folyamatában jelen levő, elkerülhetetlen statisztikus ingadozásokat.

Először a szakirodalomban elismert **ML-módszert** [35,62,65] alkalmazzuk 1000 lépésben. A dekonvolúció eredménye a IV.12. ábrán látható. Az iteráció 7,5s ideig tartott és az  $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|$  eltérés normája  $6,49 \cdot 10^3$ -ról  $1,42 \cdot 10^3$ -ra csökkent.

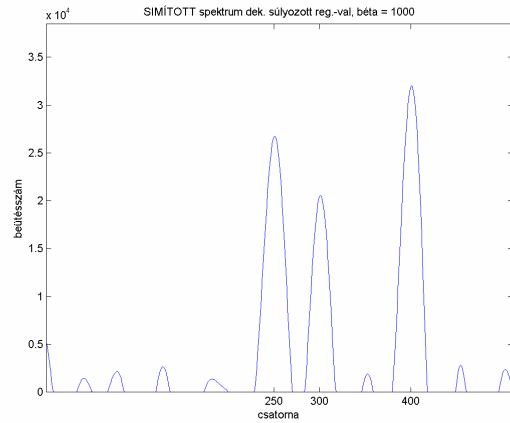


IV.12. ábra. a) Nagyon zajos, b) simított spektrum dekonvolúciója Maximum-Likelihood elvvel

Most a „**súlyozott regularizáció**” következik  $\alpha = 10^{-7}$  regularizációs paraméterrel és  $\beta = 10^3$  súlytényezővel 100 lépéses iterációban. A számítások időtartama 25,5s volt az eltérés normája pedig  $2,93 \cdot 10^4$ -ről  $2,56 \cdot 10^4$ -re csökkent. A megoldások a IV.13. ábrán láthatók.



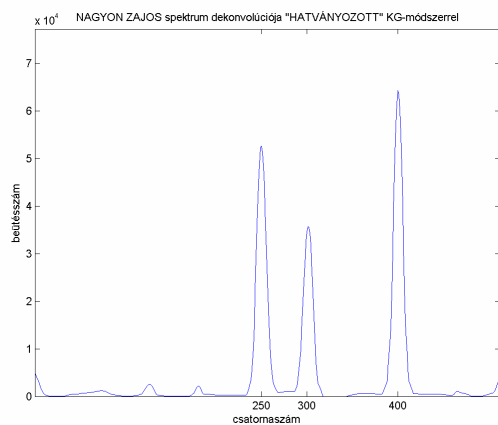
a)



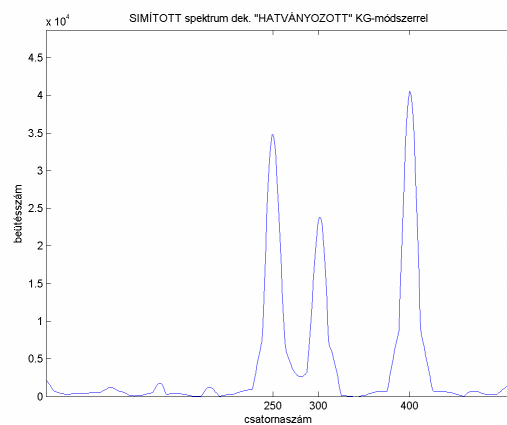
b)

**IV.13. ábra. a) Nagyon zajos, b) simított spektrum dekonvolúciója Súlyozott regularizációval**

A következő módszer a hatványozott **konjugált gradiens módszer**  $\alpha = 1,7 \cdot 10^{-3}$  regularizációs paraméterrel, 10 lépésenkénti  $\delta = 1,01$  kitevőre történő hatványozással. A számítások időtartama 13,6s volt, az eltérés normája  $2,71 \cdot 10^4$ -ről  $2,01 \cdot 10^4$ -re csökkent. Az 1000 lépéses iteráció eredménye a IV.14. ábrán tekinthető meg.



a)



b)

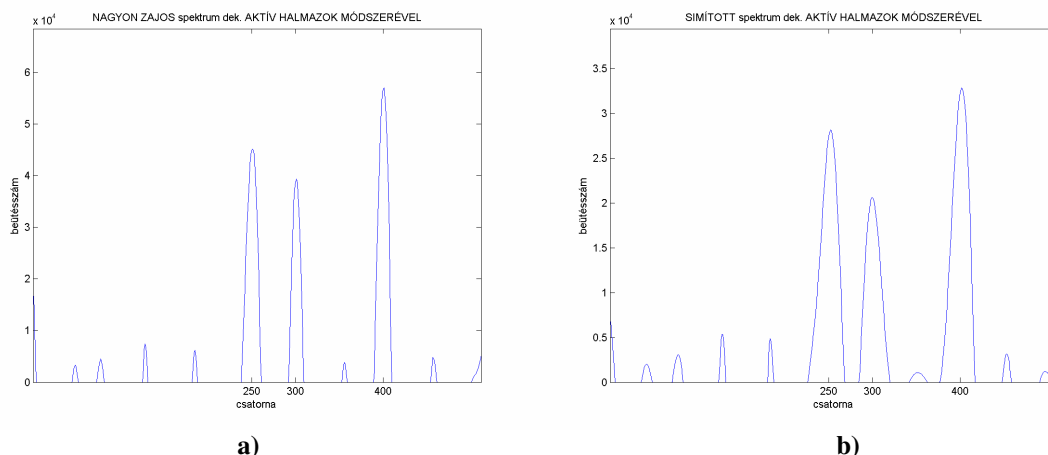
**IV.14. ábra. a) Nagyon zajos, b) simított spektrum dekonvolúciója Hatványozott KG algoritmussal**

Végül alkalmazzuk az aktív halmazok módszerét abban az esetben, amikor a nulladik iterációs ciklus a KG-módszer,  $\alpha = 10^{-5}$  regularizációs paraméterrel. A számítások időtartama 82s, az eltérés normája 25,8-ről 8,53-ra csökkent. A 150 + 300 lépéses iteráció eredménye a IV.15. ábrán látható.

Terjedelmi korlátok miatt nem vizsgálhatjuk meg az összes II. fejezetben tárgyalt dekonvolúciós módszert. A tanulmányozott 4 algoritmussal kapcsolatban az alábbi következtetésekre jutunk:

Először figyeljünk csak az ábrák a) részére! A zajt egyenletes eloszlású véletlen számokkal generáltuk, ami megfelel egy valós spektrum statisztikus fluktuációinak a Compton-

tartományban, vagy egy relatíve intenzív háttérnek, de a IV.11. a) ábrára emlékeztető spektrumot kapunk akkor is ha csak rövid idő áll rendelkezésre a spektrum felvételére, ez esetben ugyanis a „spektrumnak nincs ideje kisimulni”.



a) b)  
**IV.15. ábra. a) Nagyon zajos, b) simított spektrum dekonvolúciója  
Aktív halmazok módszerével**

Mint látható a statisztikus zajban előfordulhatnak olyan ingadozások, amelyeket minden dekonvolúciós módszer egy-egy csúcsnak érzékel. Ezek például úgy tekinthetők, mint egy intenzív Compton-kontinuum által elfedett fotocsúcsok. Ez a jelenség, mint az ábrákon látható, minden módszernél tapasztalható, hol erősebben, hol gyengébben. A ML-becslésnél például igen intenzív, a tényleges csúcsok intenzitásával összemérhető intenzitású csúcsok keletkeznek, de például a KG-módszernél a hamis csúcsok nem annyira karakteresek. A nagyon erős zaj ellenére azonban mindegyik módszer szolgáltatja a tényleges csúcsokat. A tapasztalatokat kétféle módon értékelhetjük:

1. Megnyugtató, hogy a valós csúcsok karakteresen és pontosan adódnak erős zaj esetén is. Ezzel választ kaptunk arra a felmerülő kérdésre, hogy valóban olyan dekonvolúciós módszereket sikerült-e találnunk, amelyek kevésbé érzékenyek a zajra. A válasz a valós csúcsok szempontjából az, hogy igen.

2. A statisztikus zajban megjelenő csúcsok jelenlétét kétféle módon értékelhetjük:

a) Ez egyrészt megnyugtató abból a szempontból, hogy az intenzív háttér vagy Compton tartomány mögött elrejtőző kis intenzitású csúcsokat is kimutatják az algoritmusok.

b) Nyugtalanító viszont abból a szempontból, hogy nem létező hamis csúcsok is adódnak amelyek a véletlen fluktuációknak köszönhetőek és nincs mögöttük semmiféle sugárforrás.

Ha most a b) ábrákra tekintünk, akkor a 2.b) megállapításunkat azzal tudjuk kiegészíteni, hogy az idősorok analízisében, a képanalízisben bevált simítás, képjavítás módszerének alkalmazása során a spektrum nem javul, a hamis csúcsok nem tűnnek el. Ezek alapján sajnos azt kell mondanunk, hogy a dekonvolvált spektrumban megjelenő relatíve kis intenzitású csúcsokról

nem dönthető el egyértelműen, hogy az hamis csúcs vagy egy ténylegesen megjelenő kis aktivitású forrástól származik.

Természetesen ad-hoc módszereket alkalmazhatunk: Ha például ezen csúcsokhoz tartozó energiaértékek nem felelethetők meg egyetlen létező izotópnak sem, akkor hibának tekinthetők. Ha viszont több csúcs is megjelenik és ezek energiája közötti különbség például arra utal, hogy egy fotocsúcsról és egy kiszökési vagy visszaszórási csúcsról van esetleg szó, akkor egy izotóp van a háttérben. Stb.

Visszatérve a konvolúcióra, a számítások szerint a simítás kifejezetten rossz hatással van a felbontásra. Minden módszernél azt tapasztaljuk, hogy a simított spektrum dekonvolúciójával kapott megoldás, bár „simább”, rosszabb felbontású és a hamis csúcsok intenzitása sem csökken, hanem azonos nagyságrendű marad. Tehát ki kell jelentenünk, hogy a konvolúciós simítás a megoldás javítására nem alkalmazható, a hamis csúcsok ezzel a módszerrel nem tüntethetők el, legalábbis egy bizonyos intenzitású zaj felett.

A módszerek összehasonlítása terén elmondhatjuk, hogy a zajra a maximum-likelihood algoritmus a legérzékenyebb, karakteres határozott hamis csúcsokat szolgáltat. Ennél egy fokkal jobb a témakörben nélkülözhetetlen regularizációs technika, kisebb intenzitással bár, de szintén határozott, éles csúcsokat kapunk. A vizsgált algoritmusok közül a legkevésbé érzékeny a hibára a konjugált gradiens módszer, a hamis csúcsok relatív intenzitása ebben az esetben a legkisebb. Ha ezt megfejljük az aktív halmazok módszerével, akkor a megoldás felbontása javul, de ennek az az ára, hogy a hamis csúcsok is felerősödnek. Végül is ez az oka annak, hogy a II. fejezetben több, teljesen eltérő matematikai alapokon nyugvó módszert írtunk le. Egy adott spektrumot a tapasztalatok fényében ugyanis célszerű több különböző dekonvolúciós módszerrel visszafejteni, és az összes megoldás ismeretében célszerű a végső következtetést meghozni.

Ha a megoldás „jóságának” a kritériumát keressük, látható, hogy az  $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|$  eltérésnorma sem az igazi jellemző, mert például egyrészt a simítást követően kapott megoldásra a norma minden esetben kisebb, az így előálló megoldás mégsem tekinthető jobbnak, másrészt pedig amikor a KG-módszert követően alkalmaztuk az aktív halmazok módszerét, a norma 3 nagyságrenddel csökkent, mégis intenzívebbek lettek a hamis csúcsok.

## IV.5. ÖSSZEGZETT KÖVETKEZTETÉSEK

A fejezetben megvizsgáltam a szcintillációs spektrumok zajszűrésének lehetőségét. A vizsgálatot az indokolja, hogy a II. fejezetben vizsgált algoritmusok mind azzal a kíváncsisággal születtek, hogy a zajra kevésbé érzékeny módon állítsák elő a megoldást. Nyilvánvaló kérdés, hogy a mérést terhelő zaj mesterségesen csökkenthető-e? Megvizsgáltuk tehát a problémát abból

a szempontból, hogy a zajszűrésen átesett spektrumok dekonvolúciójával kaphatunk-e pontosabb eredményt? Az apparátus az idősorok analízisében gyakran alkalmazott diszkrét Fourier-transzformáció illetve a diszkrét konvolúció. A válasz minden egyes módszer esetében egyértelműen nemleges. A konvolúciós szűrés következtében a dekonvolvált spektrumok felbontása egyértelműen romlik, a csúcsok kiszélesednek és a hamis csúcsok is felerősödnek. Tehát eredményként elkönnyvelhetjük, hogy a képjavításban, frekvenciaanalízisben olyan hatékonyan alkalmazható apparátus – bár a spektrumot természetesen simává teszi – a dekonvolúcióra rossz hatással van, a megoldás sajátosságait határozottan rontja. Pozitív eredményként könnyvelhetjük el azonban azt, hogy a II. fejezetben leírt algoritmusokról a vizsgálatok során kiderült, hogy még extrém intenzitású zaj esetén is pontosan szolgáltatják a csúcsok pozícióját. Elkönnyvelhetjük tehát, hogy a **dekonvolúciós algoritmusok nem érzékenyek a zajra.**

Mellékeredményként adódott egy egyszerű csúcskeresési eljárás, a második deriváltak előállítására. A spektrumot terhelő zaj miatt a második derivált analitikus előállítása lehetetlen – ezért nem is hoztuk szóba a II. fejezetben –, erre csakis a Fourier-transzformáció ad lehetőséget. Ezt a módszert elismert szakirodalmi források is említik [4], de le kell vonnunk a következtetést, hogy hatékonysága össze sem hasonlítható a dekonvolúciós módszerekével.



## V. FEJEZET: SZCINTILLÁCIÓS DETEKTOROK VÁLASZ MÁTRIXÁNAK ELŐÁLLÍTÁSA GENERÁLT ÉS MÉRÉSEL KAPOTT SPEKTRUMOK FELHASZNÁLÁSÁVAL

Mint azt az I. fejezetben vázlatosan már elemeztük, a válasz mátrix esetünkben az a mátrix, melynek minden oszlopa egy diszkrét valószínűség eloszlás, amely nem más, mint a detektor egyetlen monoenergiás gamma-sugárzásra, vagyis egy Dirac-deltára adott válasza, tehát az adott monoenergiás forrás esetén mért spektrum 1-re normálva. Ez, figyelembe véve a sugárzás és anyag kölcsönhatását, alapvetően két részből áll, a fotocsúcsból és a Compton-kontinuumból [1, 9]. Ezekre még rátevődik/rátevődhet a visszaszórási csúcs és az egyszeres illetve kétszeres kiszökési csúcs, sőt megjelenhet a karakterisztikus röntgen sugárzásnak megfelelő csúcs is, de ez a két tartomány mindennek az alapja. Ezek aránya a valószínűség eloszlásban függ egyrészt a detektor felépítésétől másrészt a sugárzás energiájától. Az ideális eset az lenne, ha a vizsgált energiatartományt – amely az általunk végzett mérések során általában a [0, 2-3] MeV tartomány volt, a felső határ azonban ennél nagyobb energiaérték is lehet – felosztanánk néhány keV szélességű résztartományokra és minden egyes részintervallumhoz keresnénk egy olyan gamma-sugárforrást amelynek ott és csak ott van egy monoenergiás vonala, majd minden ilyen forrás esetén kimérvénk a spektrumot, végül 1-re normálnánk. Világos azonban, hogy ez kivitelezhetetlen, mert ilyen izotópok a természetben nem léteznek, de nincs is erre szükség.

Ehhez elég ha meggondoljuk, hogy milyen jellemzői vannak egy spektrumnak:

1. Az egyik legfontosabb paraméter a fotocsúcsnak megfelelő Gauss-görbe **fél-érték szélessége**, mert ez jellemző az **energiafelbontásra**. Ezzel gyakorlatilag egyenértékű, ha ismerjük a fotocsúcs szórásának energiától való függését. Ez a paraméter a detektor szerkezetétől függ.

2. A detektor méretétől függ alapvetően a fotocsúcsához tartozó beütésszámnak, tehát a „nettó csúcsterületnek” az összes beütésszámhoz viszonyított aránya, a **„csúcs per összes” arány**.

3. Mivel a spektrum számunkra azt jelenti, hogy a detektor analizátora által meghatározott csatornához beütésszámok tartoznak, világos, hogy kapcsolatot kell teremteni a csatornák pozíciója és az eredeti sugárzás energiája között, tehát el kell végezni az **energia kalibrációt**.

Mind a fél-érték szélesség, mind a „csúcs per összes” arány függ a sugárzás energiájától, ha tetszik úgy is fogalmazhatunk, hogy függ attól, melyik csatornában detektáljuk a fotocsúcsot. Eszerint a válaszfüggvény előállításához annyit kell tennünk, hogy meghatározzuk azokat a függvényeket, amelyek leírják a szórásnak és a „csúcs per összes” arálynak az energiától – illetve, mivel az energia és a csatornaszám között közel lineáris a kapcsolat – az említett

jellemzőknek a csatorna pozíciójától való függését. Mivel ezeknek a függvényeknek fizikai törvényeken alapuló analitikus leírása gyakorlatilag kivitelezhetetlen, empirikus úton történik a függvények megadása. Néhány kalibrációs izotóp alkalmazásával kapott spektrumok alapján kiszámítjuk ezeket az értékeket, és a kapott értékekre, szabad paramétereket tartalmazó függvényt illesztünk [1,2,4]. A feladat végül az, hogy a paraméterek értékét optimálisan meghatározzuk. Ezen függvények birtokában pedig bármilyen energia esetén a válaszfüggvénynek megfelelő eloszlás generálható. A következő pontban ezeket az illesztéseket végezzük el. A válasz mátrix előállításának kérdésével foglalkozó szakirodalom nagyon szerteágazó és gazdag, példaként a [88,99] cikkeket említem.

## V.1. A KALIBRÁCIÓS FÜGGVÉNYEK PARAMÉTEREINEK ILLESZTÉSE

A paraméter-illesztési feladat tárgyalható volna egy lépésben teljesen általánosan, mi azonban az egységes tárgyalásmód érdekében minőségileg két problémakört különböztetünk meg, ezzel szeretnénk rámutatni a korábban többször alkalmazott matematikai apparátus hatékonyságára. Külön elemezzük a paraméterekben lineáris illesztési feladatot és a paraméterekben nem lineáris illesztési feladatot. Mindkettőre látunk példát az alábbiakban.

Induljunk ki abból, hogy rendelkezésünkre áll  $N$  db mérési adat, az  $u_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), helyeken a mért/számított értékek  $v_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ). Ezekre szeretnénk illeszteni egy olyan függvényt amely tartalmaz  $P$  db paramétert:  $f = f(u_i, \mathbf{a})$ , ahol tehát  $\mathbf{a} \in \mathfrak{R}^P$ , egy  $P$ -komponensű paramétervektor. A legjobb illesztés kritériuma az, hogy a

$$\Psi(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^N (v_i - f(u_i, \mathbf{a}))^2 \quad (5.1)$$

paraméterektől függő,  $P$  db változótól függő valós értékű függvény minimális értéket vegyen fel. Tehát ismét egy „legkisebb négyzetek feladata” az, amit meg kell oldanunk.

A **lineáris illesztési feladat** azt jelenti, hogy az  $f$  illesztő függvény a paraméterektől lineárisan függ (tehát nem egyenes illesztéséről van szó). Eben az esetben az  $f$  alakja

$$f(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = \sum_{p=1}^P \mathbf{a}_p \cdot \varphi_p(\mathbf{u}) \quad (5.2)$$

tehát az (5.1) minimumfeladat most a

$$\Psi(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^N \left( v_i - \sum_{p=1}^P \mathbf{a}_p \cdot \varphi_p(u_i) \right)^2 \rightarrow \min \quad (5.3)$$

alakot ölti. Ha bevezetünk egy  $\mathbf{B} \in \mathfrak{R}^{N \times P}$  mátrixot a  $B_{ip} = \varphi_p(u_i)$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ;  $p = 1, 2, \dots, P$ ) definícióval, akkor világos, hogy az (5.3) minimumfeladat sokkal egyszerűbb alakban is írható, ha alkalmazzuk az  $\mathbf{a} \in \mathfrak{R}^P$ ,  $\mathbf{v} \in \mathfrak{R}^N$  jelöléseket.

$$\Psi(\mathbf{a}) = \|\mathbf{v} - \mathbf{B}\mathbf{a}\|^2 \rightarrow \min \quad (5.4)$$

Ezzel a feladattal már többször találkoztunk a II. és III. fejezetben. A II.2. pontban megmutattuk, hogy az optimális megoldást a  $\mathbf{B}^*\mathbf{B}\mathbf{a} = \mathbf{B}^*\mathbf{v}$  Gauss-féle normálegyenlet megoldása szolgáltatja. Ennek meghatározására pedig a szokásos

$$\mathbf{a}^{(k+1)} = \mathbf{a}^{(k)} + (\mathbf{B}^*\mathbf{B})^{-1}(\mathbf{B}^*\mathbf{v} - \mathbf{B}^*\mathbf{B}\mathbf{a}^{(k)}) \quad (5.5)$$

iteráció alkalmazható. Kezdőértéknek például választhatjuk a null-vektort vagy az egységvektort.

**Nemlineáris illesztés** esetén az általános (5.1) formulából kell kiindulnunk. A szélsőérték szükséges feltételét alkalmazva adódik, hogy a

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}_p} = \sum_{i=1}^N (\mathbf{v}_i - \mathbf{f}(\mathbf{u}_i, \mathbf{a})) \cdot \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u}_i, \mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}_p} = 0 \quad (5.6)$$

( $p = 1, 2, \dots, P$ ) egyenletrendszert kell megoldani. Vezessük most be ezen deriváltakat tartalmazó vektor jelölésére a  $\mathbf{D1} \in \mathfrak{R}^P$  első derivált vektort. Ez a vektor nyilván az  $\mathbf{a} \in \mathfrak{R}^P$  paramétervektor függvénye. Az egyenlet megoldása szintén iterációval történik, az alábbi módon. Tegyük fel, hogy kezünkben van az  $\mathbf{a}^{(k)}$  közelítés. Fejtsük Taylor-sorba a  $\mathbf{D1}$  vektorfüggvényt az  $\mathbf{a}^{(k)}$  pont körül, álljunk meg a lineáris tagnál és vegyük figyelembe, hogy az (5.6) rendszert kell megoldanunk. Ekkor kapjuk, hogy

$$\mathbf{D1}(\mathbf{a}) = \mathbf{D1}(\mathbf{a}^{(k)}) + \mathbf{D2}(\mathbf{a}^{(k)}) \cdot (\mathbf{a} - \mathbf{a}^{(k)}) + \dots = 0 \quad (5.7)$$

ahol  $\mathbf{D2} \in \mathfrak{R}^{P \times P}$  a második deriváltak Hesse-mátrixa, azaz  $\mathbf{D2}_{pq} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}_p \partial \mathbf{a}_q}$ , ( $p, q = 1, 2, \dots, P$ ).

Innen egyszerű átrendezéssel kapjuk a  $(k+1)$ -edik közelítésre alkalmas iterációs formulát:

$$\mathbf{a}^{(k+1)} = \mathbf{a}^{(k)} - [\mathbf{D2}(\mathbf{a}^{(k)})]^{-1} \mathbf{D1}(\mathbf{a}^{(k)}) \quad (5.8)$$

A kezdőérték itt is lehet a null-vektor vagy az egységvektor, de megtehetjük azt is, hogy a szakirodalomból veszünk egy olyan paramétervektort, amelyet már egy konkrét detektorra kiszámítottak, és azt tekintjük az általunk vizsgált detektor esetén kezdőértéknek. Az (5.8) iteráció annyiban hasonlít (5.5)-re, hogy az invertálandó mátrix ebben az esetben is szimmetrikus a másodrendű vegyes parciális deriváltak szimmetriatulajdonsága miatt. Az általunk vizsgált detektorok paraméterillesztéséhez tehát az (5.5) és (5.8) iterációkat fogjuk használni.

Az illesztéseket valós, mért spektrumok felhasználásával végezzük el. Azonban lehetőségeink korlátozottak, az 5. Melléklet tartalmazza a rendelkezésre álló izotópokat a legfontosabb adatokkal. Ahhoz azonban, hogy jól használható válaszfüggvényt tudjunk generálni, szükséges néhány spektrum, amely kellő részletességgel tanulmányozható, van benne szeparálható fotocsúcs és karakteres Compton-tartomány. Ezért elsőként ideális, elméleti módon

előállított spektrumokat generáltunk. Erre regisztrációt követően a [www.nucleonica.net](http://www.nucleonica.net) weboldalon van lehetőség. Itt mód van a detektor típusának, a forrás aktivitásának, a mérés időtartamának és még számos paraméternek a beállítására. Mi a standard 7,62cm×7,62cm méretű NaI szcintillátort választottuk, 600s mérési idővel és 100 kBq aktivitással. Olyan izotópokat választottunk, amelyeknek egyetlen gamma vonala van, vagy esetleg több, de egymástól kellő távolságban, továbbá karakteresen kirajzolódó Compton-tartománya. (6. Melléklet) Tettük ezt azért, hogy a kalibrációkhoz szükséges adatokat kellő pontossággal kapjuk meg a spektrumokból, és így igazolhassuk, hogy a válaszfüggvény generálására javasolt eljárás valóban működik. A mért spektrumok (8., 10. és 12. Melléklet) sajnos nem kellően részletesek így csak jelentős hibával tudjuk a szükséges paramétereket az illesztésekkel meghatározni esetleg sehogyszem. A paraméterillesztéshez szükséges adatokat az 7., 9., 11. és 13. melléklet tartalmazza.

Az alábbiakban – bár az illesztés szempontjából közöttük elvi különbség nincs – az egyes függvények paramétereit más-más betűvel jelöltük azért, hogy az implementált kódokban is világos legyen, hogy mikor melyik paraméterhalmazzt alkalmazzuk, továbbá azért, hogy összhang legyen az írott szöveg és a kódok között, végül pedig azért mert a válaszfüggvény előállításához ezekre az illesztő függvényekre egy program keretében van szükség.

### V.1.1. GAUSS-GÖRBE ILLESZTÉSE A FOTOCSÚCSOKRA

Fontossága miatt erre a kérdésre már az I.2. pontban kitértünk és az (1.9-1.15) formulák tartalmazzák is a megoldást. A MATLAB természetesen tartalmaz egy beépített függvényt, amely egyetlen parancs hívásával szolgáltatja a paramétereket, azonban az egységes szemlélet és tárgyalásmód miatt felhívjuk a figyelmet, hogy ez egy V.2. típusú illesztési probléma. Az illesztő függvény, a Gauss-görbe, a paraméterekben nemlineáris, de a logaritmusa már igen. Így ebben az esetben egy

$$f(x) = \ln(g(x)) = g_1 + g_2 \cdot u + g_3 \cdot u^2 \quad (5.9)$$

paraméterekben lineáris függvényt illesztünk, ahol  $\varphi_1(u) = 1$ ,  $\varphi_2(u) = u$ ,  $\varphi_3(u) = u^2$ , az iterácóban szereplő **B** mátrix *i*-edik sora tehát így írható:  $(1, u_i, u_i^2)$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ . Az (5.5) iteráció innen már alkalmazható, az  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$  paraméterek és a Gauss-függvényt megadó  $\{m, \sigma, A\}$  paraméterek kapcsolata az (1.15) formulákból már adódik. Az alábbiakban mi is ezzel az iterációval határozzuk meg az illesztett Gauss-görbék paramétereit.

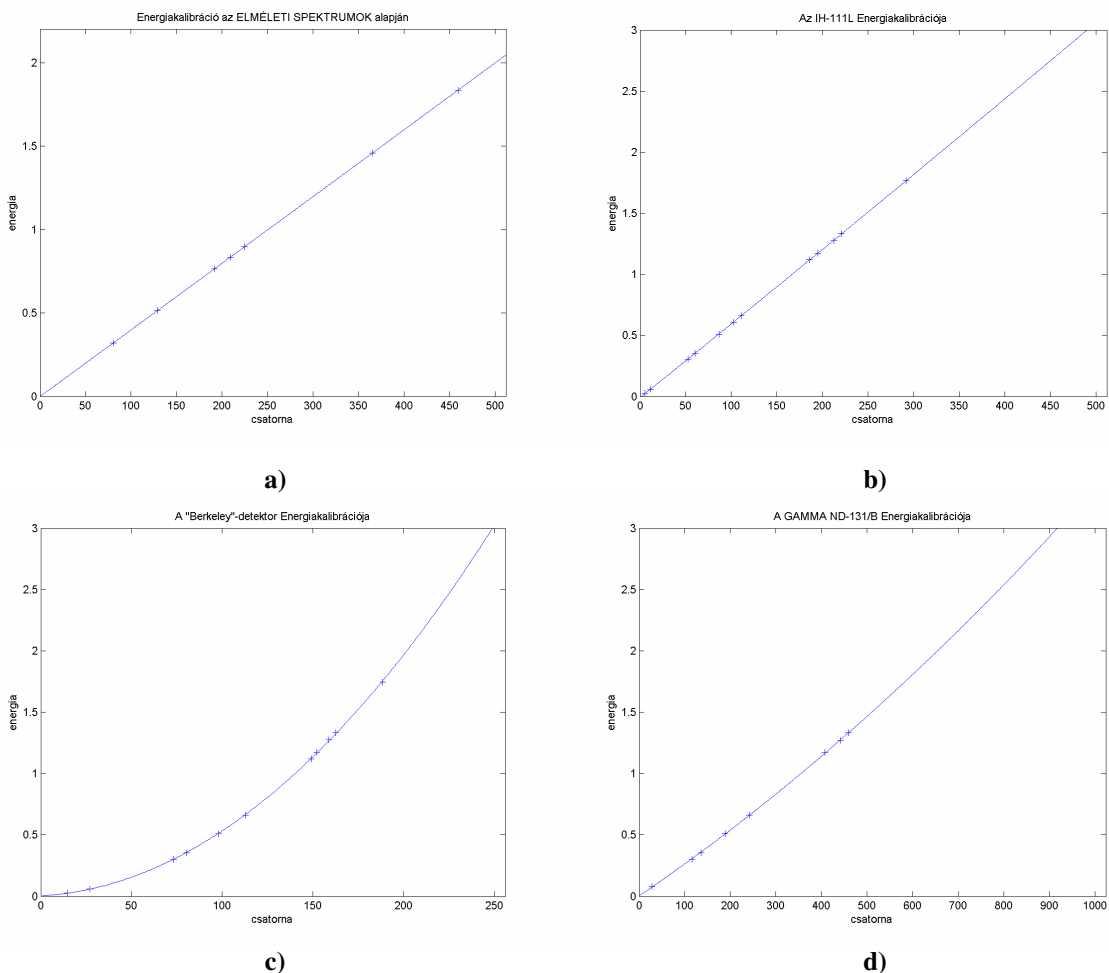
A vizsgálni kívánt spektrumnak ezek után kiválasztjuk azt a részét, amelyre Gauss-görbét szeretnénk illeszteni úgy, hogy megadjuk a kiválasztott intervallum végpontjait, majd elvégezzük az illesztést, amelyből azonnal adódik a csúcs pozíciója és a szórás illetve a fél-érték szélesség. A számított adatokat az 7., 9., 11. és 13. Melléklet tartalmazza.

## V.1.2. ENERGIAKALIBRÁCIÓ

Az energiakalibráció szolgáltatja a csatornák pozíciója és a gamma-energia közötti kapcsolatot. Ez a kapcsolat közel lineáris, de a szakirodalomban [1, 2, 7] egy kissé pontosabban, másodfokú függvénnyel írják le a kettő közötti összefüggést. Ennek a függvénynek az alakja

$$E(c) = a_1 + a_2 \cdot c + a_3 \cdot c^2 \quad (5.10)$$

ahol  $c$  jelöli a csatorna pozícióját. Ez tehát egy ugyanolyan probléma, mint a Gauss-görbe illesztése az előző pontban. Az iterációs  $\mathbf{B}$  mátrix  $i$ -edik sora tehát így írható:  $(1, c_i, c_i^2)$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ , és világos, hogy  $v_i = E(c_i) = E_i$ . Dekonvolúciós módszerrel meghatározzuk  $N$  db kalibrációs izotóp esetén a fotocsúcs  $c_i$  pozícióját, táblázatból vesszük az  $E_i$  gamma energiákat és ezután az (5.5) iteráció szolgáltatja az  $a_1, a_2, a_3$  paramétereket.



V.1. ábra. Energiakalibráció: a) elméleti; b) IH-111L; c) „Berkeley”-detektor; d) „GAMMA”-detektor

Az V.1. a), b), c) és d) ábrán látható rendre az elméleti spektrumokra illetve az IH-111L, a „Berkeley” és a „GAMMA” spektroszkópokkal felvett spektrumok alapján elvégzett energia kalibráció grafikusan. Az energia az alábbiakban mindenütt MeV egységben veendő. Az iterációk eredményeként kapott paramétereket az V.1. táblázat tartalmazza.

detektor	$a_1$	$a_2$	$a_3$
elméleti	$-7,8709 \cdot 10^{-4}$	$3,9892 \cdot 10^{-3}$	$2,2326 \cdot 10^{-8}$
IH-111L	$-9,0437 \cdot 10^{-3}$	$6,0110 \cdot 10^{-3}$	$2,5215 \cdot 10^{-7}$
„Berkeley”	$3,9863 \cdot 10^{-3}$	$7,5551 \cdot 10^{-4}$	$4,5280 \cdot 10^{-5}$
„GAMMA”	$3,9517 \cdot 10^{-3}$	$2,5186 \cdot 10^{-3}$	$8,1149 \cdot 10^{-7}$

V.1. táblázat. Energia kalibráció az egyes detektorokra. Az V.10. függvény paraméterei.

Mint látható, az illesztett függvény a c) esetben, tehát a 256 csatornás „Berkeley” detektor esetében tér el legjobban a lineáristól. Ez az  $a_3$  együtthatóban is tükröződik, amely legalább 2 nagyságrenddel nagyobb, mint a többi esetben, amelyekben valóban jó közelítéssel teljesül a linearitás. A detektorok energia-kalibrációját ezzel elvégeztük.

Természetesen szükség van a fordított kapcsolatra, azaz arra a függvényre, amely adott E energia esetén szolgáltatja az E-hez tartozó csatorna pozícióját. Ez – tekintettel arra, hogy  $a_2$  minden esetben pozitív – egész egyszerűen az (5.10) másodfokú egyenlet pozitív megoldásával van adva. Az E(c) energiához tartozó csatorna tehát a

$$c(E) = \frac{-a_2 + \sqrt{a_2^2 - 4a_3(a_1 - E(c))}}{2a_3} \quad (5.11)$$

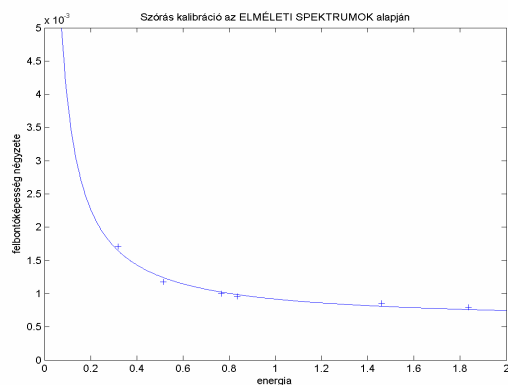
formulával kapható.

### V.1.3. SZÓRÁS KALIBRÁCIÓ

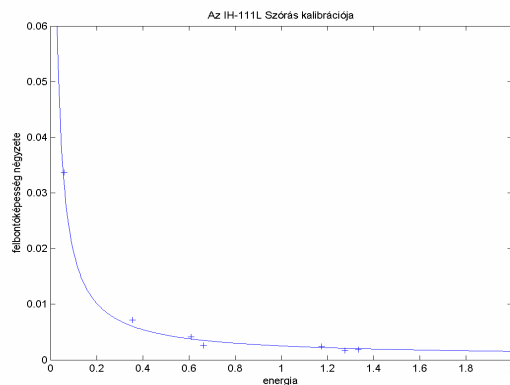
A szakirodalomban a „felbontóképesség–energia” függvénykapcsolatot szokták vizsgálni [1, 2, 7]. Az  $\eta$  energia-felbontást az I.8. formulával már a bevezetőben definiáltuk. Ott világossá vált, hogy ez a mennyiség alapvetően a w félérték szélességtől függ, ez utóbbi azonban (1.11) szerint szigorúan egyenesen arányos a  $\sigma_E$  szórással – az E indexszel arra utalunk, hogy a szórást energia-egységben kell mérni –. Így az  $\eta = w/E$  függvény helyett kalibrálhatjuk a válaszfüggvény generálása szempontjából közvetlenebb  $\eta_0 = \sigma_E/E$  függvényt. Ez a függvény a tapasztalatok alapján jól leírható az

$$\eta_0 = \sqrt{b_1 + \frac{b_2}{E(c)}} \quad (5.12)$$

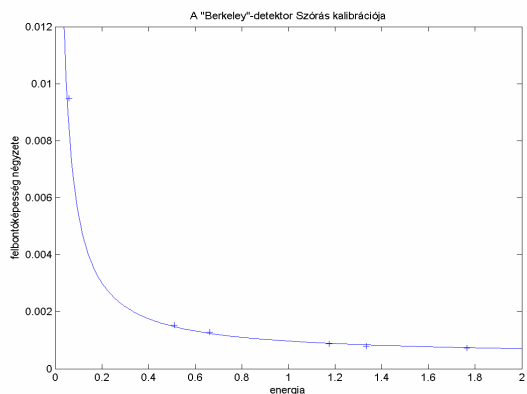
függvénnyel. Ez a függvény a paraméterekben nem lineáris, de a négyzete már igen. Így feladatunk az  $\eta_0^2$  függvény optimális paramétereinek meghatározása, ami így szintén lineáris paraméterillesztési probléma. Az iterációs **B** mátrix i-edik sora ebben az esetben:  $(1, 1/E_i)$ ,  $(i = 1, 2, \dots, N)$ , és világos, hogy  $v_i = \eta_{0i}^2 = \sigma_{Ei}^2/E_i^2$ . A kalibráló izotópok spektrumában tehát keresünk fotocsúcsokat, ezekre az V.1.1. pont szerint Gauss-görbét illesztünk, kiszámítjuk a  $\sigma_{Ei}$  szórást minden csúcs esetén, és alkalmazzuk az (5.5) iterációt.



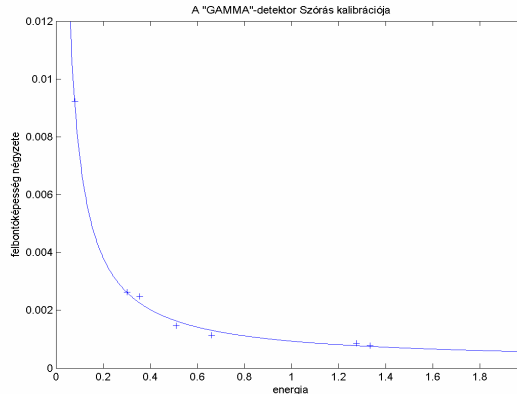
a)



b)



c)



d)

V.2. ábra. Szórás kalibráció: a) elméleti; b) IH-111L; c) „Berkeley”-detektor; d) „GAMMA”-detektor

Mint hangsúlyoztuk, a  $\sigma_E$  szórást energia egységben mérjük, ha azonban Gauss-görbét illesztünk a fotocsúcsra, akkor az illesztésből a szórás közvetlenül természetesen „csatorna” egységben ( $\sigma$ ) adódik. Ezt át kell számítani energiakülönbségre ( $\Delta E$ ). Ez az energiakülönbség az (5.10) függvénybe történő helyettesítéssel egyszerűen adódik:

$$\Delta E = \sigma_E = E(c + \sigma) - E(c) = a_2\sigma + 2a_3c\sigma + a_3\sigma^2 \quad (5.13)$$

ahol  $c$  az  $E$  energiájú csúcs pozíciója és  $\sigma$  a  $c$  pozícióban az illesztésből kapott szórás „csatorna” egységben. A szórás-energia kalibrációs algoritmusban ezt a konverziót be kell iktatni.

detektor	$b_1$	$b_2$
elméleti	$5,7242 \cdot 10^{-4}$	$3,4614 \cdot 10^{-4}$
IH-111L	$5,5465 \cdot 10^{-4}$	$1,9603 \cdot 10^{-3}$
„Berkeley”	$4,4082 \cdot 10^{-4}$	$5,3391 \cdot 10^{-4}$
„GAMMA”	$2,0193 \cdot 10^{-4}$	$7,3188 \cdot 10^{-4}$

V.2. táblázat. A szórás-kalibrációs függvény paraméterei; a) elméleti spektrumok; b) IH-111L-detektor; c) „Berkeley”-detektor; d) „GAMMA”-detektor esetében

Az egyes detektorokra vonatkozólag a kalibrációs függvények grafikus képe az V.2. ábrán látható, az (5.12) függvény paramétereit pedig az V.2. táblázat tartalmazza.

#### V.1.4. A „CSÚCS PER ÖSSZES” FÜGGVÉNY KALIBRÁCIÓJA

A nettó csúcsterület összes beütésszámhoz viszonyított aránya az

$$\varepsilon(E(c), d_1, d_2) = 1 - d_1 \cdot \exp\left(-\frac{d_2}{E(c)}\right) \quad (5.14)$$

függvénnyel írható le. Ha az energia helyett a jelen célok szerint ideálisabb  $c$  csatornaszámot választjuk, akkor figyelembe véve a közel lineáris  $E(c)$  függvénykapcsolatot egy ugyanilyen függvény illeszthető az  $\varepsilon(c, d_1, d_2)$  arány csatornapozíciótól való függésére. Ez a  $d_1$  és  $d_2$  paraméterekben nem lineáris illesztés, így (5.5) helyett az általánosabb (5.8) iterációs formulát kell használnunk. Az (5.1) minimumfeladat most a következő kétváltozós, valós értékű függvény szélsőértékének meghatározását jelenti:

$$\Psi(d_1, d_2) = \sum_{i=1}^N \left( \varepsilon_i - \left( 1 - d_1 \cdot \exp\left(-\frac{d_2}{c_i}\right) \right) \right)^2 \rightarrow \min \quad (5.15)$$

Innen az első deriváltak a

$$D1(p) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi(d_1, d_2)}{\partial d_p} = \sum_{i=1}^N \left( \varepsilon_i - \left( 1 - d_1 \cdot \exp\left(-\frac{d_2}{c_i}\right) \right) \right) \cdot \frac{\partial}{\partial d_p} \left( 1 - d_1 \cdot \exp\left(-\frac{d_2}{c_i}\right) \right) \quad (5.16)$$

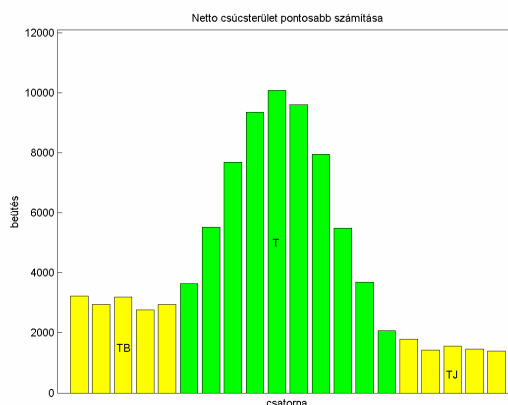
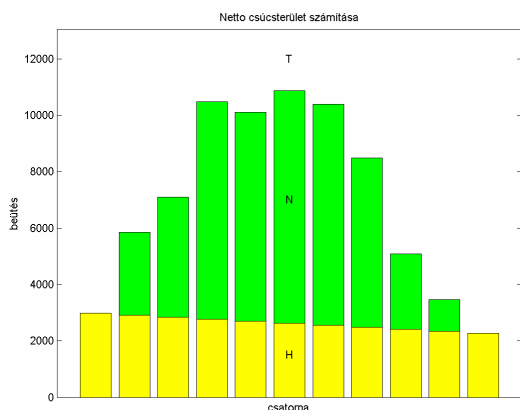
egyenlőség alapján számíthatók, ( $p = 1, 2$ ) a második deriváltakat pedig a

$$D2(p, q) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi(d_1, d_2)}{\partial d_p \partial d_q} = \frac{\partial}{\partial d_q} \sum_{i=1}^N \left( \varepsilon_i - \left( 1 - d_1 \cdot \exp\left(-\frac{d_2}{c_i}\right) \right) \right) \cdot \frac{\partial}{\partial d_p} \left( 1 - d_1 \cdot \exp\left(-\frac{d_2}{c_i}\right) \right) \quad (5.17)$$

összefüggéssel határozzuk meg ( $p = 1, 2$ ;  $q = 1, 2$ ). Ezzel megszerkesztettük a  $\mathbf{D1} \in \mathfrak{R}^2$  és  $\mathbf{D2} \in \mathfrak{R}^{2 \times 2}$  deriváltakat, így az (5.8) iterációs formula már alkalmazható.

A paraméterillesztést megelőzően azonban számítanunk kell az elméletileg előállított, illetve mért spektrumok alapján a kalibrációs izotópokhoz tartozó foto-csúcsok esetén a nettó csúcsterületet. Erre két eljárást alkalmaztunk. Az alap gondolat az, hogy a foto-csúcsnak megfelelő Gauss-eloszlási görbe egy jó közelítéssel lineárisnak tekinthető háttéren vagy bizonyos tartományon belül az ugyancsak lineáris függvénnyel közelíthető Compton-tartományra tevődik rá (ez utóbbi vizsgálatára az V.2.2. pontban részletesen kitérünk). A nettó csúcsterület számítása azt célozza, hogy a háttérrel illetve Compton-tartományt levonjuk. Az első egyszerűbb és nagyobb hibával alkalmazható eljárás abban az esetben alkalmazható, ha a fotocsúcs körül nem rajzolódik ki karakteresen az említett két tartomány valamelyike, például közel eső fotocsúcsok vagy akár közeli Compton-él esetén. Ekkor a csúcsra illesztünk egy Gauss-eloszlást, és a középérték körüli háromszoros szórásnyi ( $3\sigma$ ) intervallumban kiszámítjuk az összes beütésszámot ( $T$ ), majd az intervallum két végét egyenessel összekötve kiszámítjuk a kapott trapéz területét ( $H$ ), majd a két értéket kivonjuk egymásból („trapézlevonás”), tehát a nettó csúcsterület ekkor  $N = T - H$  (V.3. a) ábra).





a) b)  
**V.3. ábra. Nettó csúcsterület számításának két módszere**

Ha viszont karakteresen kirajzolódik a háttér, akkor a „trapézlevonás”-t kisebb hibával is meg tudjuk valósítani, ha a középérték körüli háromszoros szórásnyi ( $3\sigma$ ) intervallum két oldalán még kijelölünk egy-egy intervallumot, melyeknek hossza a fotocsúchhoz rendelt intervallum hosszának a fele. Ezek után számítjuk a fotocsúcs alatti teljes beütésszámot (T), majd az a) ábrán H-val jelölt trapézterület megfelelőjét a b) ábrán bal és jobb oldalon kijelölt intervallumokban észlelt beütésszámok összegével közelítjük, tehát a  $H = TB + TJ$  közelítést alkalmazzuk. Ebben az esetben az  $N = T - (TB + TJ)$  adja a nettó csúcsterület közelítését (V.3. b) ábra). Tekintettel arra, hogy kétszeres hosszúságú intervallum alapján számolunk, továbbá nem kettő hanem  $3\sigma+3\sigma$  számú csatorna összes beütésszáma alapján közelítjük a trapéz területét, ez utóbbi módszer hatékonyabban átlagolja, illetve korrigálja a statisztikus ingadozásokból adódó hibákat.

Világos, hogy a kérdéses arány számításához olyan spektrumra van szükség, amelyben egyetlen fotocsúcs van, hiszen több fotocsúcs jelenléte esetén bár kiszámíthatóak a nettó csúcsterületek, ezeket nem lehet együttesen viszonyítani az összes beütésszámhoz, hiszen a kérdéses arányának éppen az energiától való függését keressük, ebben az esetben pedig ez az energiafüggés kiátlagolódik. Sajnálatos módon a rendelkezésre álló izotópokkal nem volt lehetőségünk ilyen spektrumot felvenni (8., 10. 12. Melléklet), minden spektrumban több fotocsúcs van. Ezért kénytelenek voltunk az elméleti úton generált spektrumok alapján illusztrálni az illesztési eljárást illetve alkalmazni az (5.8) iterációt. Erre kiválóan alkalmas például a K40, Cr51, Mn54, Sr85 és Nb95 izotópok spektruma (6. Melléklet).

Ezt az eljárást négy különböző esetben megismételtem. Egyszer elvégeztem az illesztést a program által felkínált standard paraméterekkel, amelyek alkalmazása mellett a mesterséges spektrumokat is felvettem, majd elvégeztem az illesztést olyan módon, hogy a három valós detektor szükséges adatait is megadtam. A spektrumgeneráló program ugyanis lehetővé teszi, hogy beállítsuk a mérési időt, az aktivitást, a mérési geometriát, a detektor típusát, a méréshatárt

illetve ami ezzel egyenértékű az egy csatornára jutó energiakülönbséget, valamint két karakterisztikus pontban a fél-érték szélességet. Ezeket az adatokat azonnal megkapjuk az V.1.2. és V.1.3. pontbeli illesztések, tehát az (5.10) és (5.12) függvények és az V.1. és V.2. táblázatok alapján. A spektrumgenerálásra használt adatokat az V.3. táblázatban foglaltuk össze.

A szimulált Detektor	Csatornaszám	energia/csatorna (keV/csatorna)	időtartam (s)	aktivitás kBq	FWHM (122keV)	FWHM (1332 keV)
elméleti	512	4	600	100	18	90
IH-111L	512	6	600	100	36,96	140,9
„Berkeley”	256	10	300	100	19,89	90,81
„GAMMA”	1024	3	300	100	22,51	85,83

V.3. táblázat. Az egyes detektorok „csúcs per összes”-kalibrációjához használt paraméterek

Az (5.16) és (5.17) formulákra épülő iterációval azonban van egy kis baj. **Nem konvergál** a szokásos kezdőértékekkel, tehát az (1, 1) kezdő érték pár esetén nem kapunk konvergens iterációt. Ezt a problémát kétféle módon oldhatjuk meg. Egyrészt megtehetjük azt, hogy keresünk jobb kezdőértékeket. Ezt akár a szakirodalomból is vehetjük [88,93] – hiszen a 7,62cm × 7,62cm méretű NaI kristályok között nincs alapvető különbség –, vagy próbálgatással is kereshetünk olyan értékpárt, amelyre az illesztett függvény közelíti a mérési eredményeket. Azt találtuk, hogy a  $d_1^{(0)} = 1$ ,  $d_2^{(0)} = 0,5$  érték pár erre a célra kiválóan megfelel. (Pontosabban szólva, az eljárás pl. a  $d_1 \in [0,7; 1,1]$ ,  $d_2 \in [0,3; 0,8]$  intervallumok esetén konvergens, ezeken kívül azonban már divergál.) Egy 10 lépéses iteráció után a szomszédos megoldások eltérésének normája már  $10^{-17}$  nagyságrendű. Egy másik lehetőség az iteráció stabilizálása. A tapasztalat szerint, ha az (5.1) függvény eltérését vizsgáljuk két egymást követő iterációs paramétervektor esetén, akkor az adódik, hogy a **D2** második derivált mátrix helyett célszerű azt a  $\mathbf{D} \in \mathfrak{R}^{2 \times 2}$  mátrixot választani iterációs mátrixnak, melynek definíciója:

$$\mathbf{D}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial f}{\partial d_p} \cdot \frac{\partial f}{\partial d_q} \right) \quad (5.18)$$

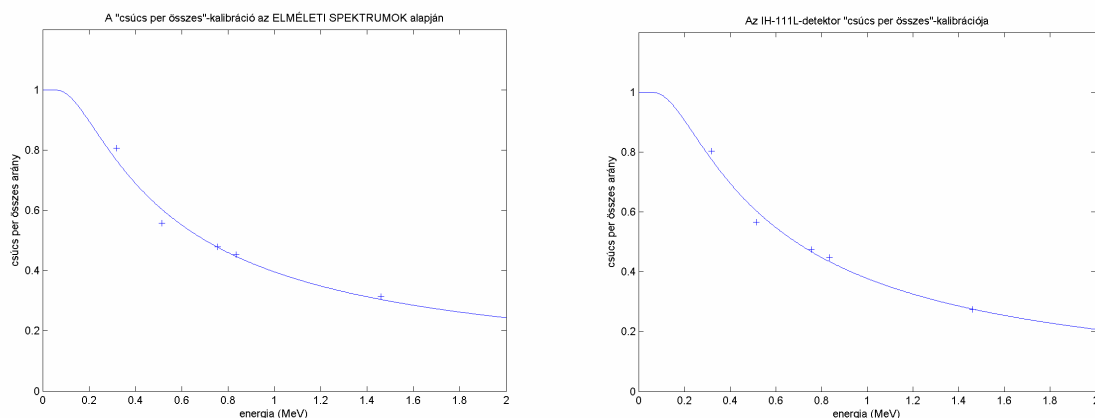
( $\mathbf{p}, \mathbf{q} = 1, 2$ ). Ekkor az (5.8) iteráció szerepét átveszi az

$$\mathbf{a}^{(k+1)} = \mathbf{a}^{(k)} + [\mathbf{D}(\mathbf{a}^{(k)})]^{-1} \mathbf{D1}(\mathbf{a}^{(k)}) \quad (5.19)$$

iterációs formula. Ennek előnye, hogy nem szükséges kiszámítani a második deriváltakat. Ha ezt az iterációt alkalmazzuk a paraméterillesztéshez, akkor a tapasztalat szerint az eljárás a kezdőértékek sokkal szélesebb tartománya esetén konvergálni fog. Ekkor nyugodtan alkalmazhatjuk az (1, 1) kezdőérték párt, és 10 lépés után ugyanazt az eredményt kapjuk, mint az előző esetben, ekkor a pontosság  $10^{-9}$  nagyságrendű. (Összehasonlítva az előzővel, az iteráció ebben az esetben már a tágabb  $d_1 \in [0,4; 3]$  és  $d_2 \in [0,1; 2]$  intervallumok esetén is stabil.) Ez a pontosság céljainknak azonban kiválóan megfelel. Az eljárás utóbb leírt módosítása az általános

esetben is alkalmas az (5.8) iteráció stabilizálására, bár kiemeljük, hogy vizsgálatainkban ez volt az első eset, amikor instabilitás mutatkozott a közelítések számítása során.

Az említett izotópok spektruma alapján számított nettó csúcsterületek és az összes beütésszámok a 7. mellékletben megtalálhatók. Az illetett (5.14) függvény grafikus képe, valamint a mérési adatoknak megfelelő pontok az V.4. ábrán láthatók.



a) b)  
**V.4. ábra. A „csúcs per összes”-arány kalibrációja;**  
**a) elméleti spektrumok alapján; b) IH-111L-detektor esetén**

Tekintettel arra, hogy grafikusán alig észlelhető különbség az egyes görbék között – takarékoskodva a helyvel –, nem szerkesztettük be az összes detektor esetére az illetett görbét, csak az illesztés alapján kapott paraméterek értékét foglaltuk bele az V.4. táblázatba.

„detektor”	$d_1$	$d_2$
elméleti spektrum	$9,4715 \cdot 10^{-1}$	$4,5006 \cdot 10^{-1}$
IH-111L	1,0091	$4,8343 \cdot 10^{-1}$
„Berkeley”	$9,4720 \cdot 10^{-1}$	$4,5073 \cdot 10^{-1}$
„GAMMA”	$9,4436 \cdot 10^{-1}$	$4,4697 \cdot 10^{-1}$

**V.4. táblázat: A „csúcs per összes”-függvény paramétereinek értéke az egyes detektorokra vonatkozólag**

A táblázatból kitűnik, hogy a paraméterek értéke igen kevésbé függ a detektor csatornáinak számától – amit józan ésszel el is vártunk –, egyetlen kivétel az IH-111L detektor, ahol a többihez képest számottevőbb az eltérés, de ennek az az oka, hogy ebben a detektorban a szcintillátor CsI kristály, a többiben pedig NaI. Ez az eltérés az V.3. táblázatban is jól látható. A 3. sorból kitűnik, hogy a CsI szcintillátor esetén a félérték szélesség – nem csak a két karakterisztikus pontban hanem az (5.12) függvény szerint mindenütt – számottevően, mintegy 50-80%-kal nagyobb.

## V.1.5. HIBASZÁMÍTÁS

Terjedelmi korlátok miatt, továbbá mert értekezésemben nem mérési eredmények kiértékelésével foglalkozom, nem iktattam be sehol a hibaszámítást, vagy pontosabban szólva a mérés bizonytalanságának kérdéskörét. De nyilvánvaló, hogy ha az V.1. pont paraméterbecslési algoritmusainak eredményét értékeljük, ha a válaszmátrix előállításához szükséges kalibrációs függvényeket parametrizáljuk, illetve ha az ezekhez szükséges számításokat, méréseket elvégezzük, nélkülözhetetlen a bizonytalanság becslése. A téma szakirodalma bőséges, én a [4,55,58,59] köteteket említem.

Bevezető példaként bemutatom az aktivitás számításához és a „csúcs per összes” függvény kalibrációjához egyaránt szükséges nettó csúcsterület meghatározásának bizonytalanságát. Az V.3.a) ábrán, ahol a Compton-hátteret vonjuk le az  $N = T - H$  formula szerint, a hibabecslésre két lehetőség van. Ha feltételezzük, hogy a T és H függetlenek, akkor – tekintettel arra, hogy független valószínűségi változók összegének szórásnégyzete a szórásnégyzetek összege –, kapjuk, hogy  $\sigma_N^2 = \sigma_T^2 + \sigma_H^2$ . Figyelembe véve, hogy a beütésszám Poisson eloszlást követ, teljesül, hogy  $\sigma_T = \sqrt{T}$ , hasonlóan az intervallum bal és jobb végpontjában a beütésszámot rendre B-vel és J-vel jelölve, ezek szórása rendre  $\sqrt{B}$  és  $\sqrt{J}$ . Az idézett tétel szerint a trapéz területének hibája  $\sigma_H = L\sqrt{B+J}/2$ , ahol L jelöli a csúcshoz tartozó intervallumok számát. Ezzel a nettó csúcsterület abszolút hibája  $\sigma_N = \sqrt{T + L^2(B+J)}/4 = \sqrt{N + H(L/2 + 1)}$ . Világos azonban, hogy a T nettó csúcsterület nem független a B és J mennyiségektől, pontosabban nem korrelálatlanok. Az előbbi eredmény módosításra szorul, a pontos eredmény  $\sigma_N = \sqrt{N + H(L/2 - 1)}$ .

Ez az eredmény a valószínűségelmélet általános tételeinek illetve ezek következményeinek speciális esete. Ezekre a tételekre szükség van minden fent említett esetben, ezért vázlatosan bemutatom a legfontosabb ide vonatkozó összefüggéseket. Ha a  $\xi$  valószínűségi változó az  $a_1, a_2, \dots, a_r$  paraméterektől függ a  $\xi = f(a_1, a_2, \dots, a_r)$  függvény szerint, továbbá az  $a_1, a_2, \dots, a_r$  mennyiségek **függetlenek**, akkor a  $\xi$  változó  $\sigma^2(\xi)$  szórásnégyzetének és az egyes paraméterek  $\sigma^2(a_i)$  szórásnégyzetének kapcsolatát a Gauss-törvény írja le:

$$\sigma^2(\xi) = \sum_{i=1}^r \left( \frac{\partial f}{\partial a_i} \right)^2 \sigma^2(a_i) \quad (5.49)$$

A paraméterillesztésekkel kapott függvényértékek bizonytalanságát ezzel a formulával kell becsülni. Ha azonban a paraméterek **nem függetlenek** a Gauss-törvény **korrelált mennyiségekre** vonatkozó alábbi általánosítását kell alkalmazni:

$$\sigma^2(\xi) = \sum_{i=1}^r \left( \frac{\partial f}{\partial a_i} \right)^2 \sigma^2(a_i) + 2 \sum_{i=1}^r \sum_{k < i} \frac{\partial f}{\partial a_i} \frac{\partial f}{\partial a_k} \cdot \text{cov}(a_i, a_k) \quad (5.50)$$

ahol a kovarianciát a statisztikából ismert

$$\text{cov}(a_i, a_k) = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (a_{ij} - \bar{a}_i)(a_{kj} - \bar{a}_k) \quad (5.51)$$

formulával számítjuk, ha rendelkezésre áll  $n$  db mérési eredmény. Azonban ez a gyakorlatban nem mindig teljesül, előfordul, hogy mindössze egyetlen adatunk van, amely egy ismert eloszlású valószínűségi változónak egy adott értéke. Ebben az esetben, ha feltesszük, hogy  $a_i$  és  $a_k$  korrelálnak, vagyis létezik legalább egy olyan mennyiség – legyen ez „ $b$ ” –, amelytől mindkettő függ, akkor a kovariancia a következő összefüggéssel számítható:

$$\text{cov}(a_i, a_k) = \frac{\partial a_i}{\partial b} \frac{\partial a_k}{\partial b} \sigma^2(b) \quad (5.52)$$

Az (5.49) és (5.50) formulák alkalmazásával – (5.51) és (5.52) figyelembe vétele mellett – a bizonytalanság becsléséhez szükséges számítások elvégezhetők.

Meglepő módon akkor is szükség lehet az általánosabb (5.50) formula alkalmazására, ha nyilvánvalóan független mennyiségek hibabecslését végezzük. Példaként említem az értékezésem tárgyát képező három alapvető mennyiség, az aktivitás becsléséhez szükséges nettó csúcsterület, a Gauss görbével közelített csúcsok szórásának vagy félértékszélességének és a csúcspozícióknak vagy gamma energiáknak a kapcsolatát. Világos, hogy ezek fizikai szempontból teljesen független mennyiségek, matematikai kifejezéssel élve, páronként független valószínűségi változók. A nettó csúcsterület az izotóp aktivitásától, a mérési geometriától függ, a félérték-szélesség a detektorra, a kristályra és az elektronikus rendszerre jellemző adat, a gamma energia pedig gyakorlatilag hiba nélkül ismehető – de nem a mérésből hanem – a szakirodalomból.

Mivel – mint az I.1. pontban már említettem – a spektrum gyakorlatilag egy hisztogram, nem pontos energiaértékeket szolgáltat, hanem adott energia intervallumra kiterjedő összeget jelent, a szomszédos hisztogram-oszlopokra illesztett Gauss-görbe középértéke hibával terhelt. Nem adódik tehát pontosan a gamma energia. Az V.10. illesztőfüggvény tekintetbe vételével, a  $c$  csatornához tartozó  $E(c)$  energia szórásnégyzetére az (5.50) formula alapján a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} \sigma^2(E(c)) = & \sigma^2(c)(a_2 + 2a_3c)^2 + \sigma^2(a_1) + \sigma^2(a_2) \cdot c^2 + \sigma^2(a_3) \cdot c^4 + \\ & + 2 \text{cov}(a_1, a_2) \cdot c + 2 \text{cov}(a_1, a_3) \cdot c^2 + 2 \text{cov}(a_2, a_3) \cdot c^3 \end{aligned} \quad (5.52)$$

A becsült hiba, ennek négyzetgyöke. Hasonló módon becsülhető a félértékszélesség hibája is. Ezeknek a hibáknak a kapcsolatát, a mérési eredményekre gyakorolt együttes hatását az említett

mennyiségek sztochasztikus kapcsolatát leíró  $C$  kovarianciamátrix határozza meg. Ennek a szimmetrikus  $C$  mátrixnak a főátlójában állnak a szórásnégyzetek, a főátló alatt és felett pedig az (5.51) illetve (5.52) – értelmezésből adódóan szimmetrikus – kovarianciák állnak. A szórásnégyzetek nyilván pozitív mennyiségek, a kovarianciák azonban nem kötött előjelűek. Ha két adott mennyiség kovarianciája negatív, ez azt jelenti, hogy az egyik mennyiség adott értelmű változása, maga után vonja – nyilván sztochasztikus értelemben – a másik mennyiség ellentétes értelmű változását. Ha tehát az említett mennyiségek hibáinak együttes hatását vizsgáljuk, vagyis azt, hogy az egyik hibájának milyen hatása van a másik mennyiség hibájára, akkor a kovarianciák előjelét kell megvizsgálni. Megnyugtató eredmény akkor adódik, ha a kovarianciamátrix főátlón kívüli komponensei, tehát a kovarianciák mind negatívak, mert ez azt jelenti, hogy a egyes mennyiségek hibái kompenzálják egymást.

## **V.2. A VÁLASZ MÁTRIX GENERÁLÁSA**

Az előző négy kalibrációs függvény birtokában már generálhatjuk a válaszfüggvényt minden egyes szcintillációs detektorra. A válaszfüggvény előállításánál két lényegesen különböző részletre kell odafigyelnünk, a Gauss-görbével leírható csúcsokra (foto-, visszaszórási-, kiszökési-, stb) és a Compton-tartományra. Mivel ez elvileg is két különböző feladat és az algoritmus illetve a kód is ennek megfelelően két részre bomlik, két pontban tárgyalom.

### **V.2.1. A FOTOCSÚCS GENERÁLÁSA MONTE-CARLO ALGORITMUSSEL**

A fotocsúcs egyszerűen megadható analitikus alakban, ilyen módon is előállítható válaszfüggvény. Mivel azonban a szakirodalomban nagyon gyakran alkalmaznak különböző Monte-Carlo algoritmusokat [100,109] a problémakörben – melyekre csak egy-egy mozaikszóval hivatkoznak, tehát nem lehet tudni pontosan, hogy „mi van mögöttük” –, ezért mi is egy egyszerű Monte-Carlo algoritmust szerkesztettünk a válaszfüggvény előállítására. Ennek az az előnye a sima, analitikus függvényekhez képest, hogy jobban hasonlít a valós spektrumokhoz, hiszen a detektor impulzus válasza mindig tartalmaz statisztikus ingadozásokat, sosem sima függvény, ezt jól tükrözi a véletlen számokkal generált impulzus válasz. Ha sima függvényre van szükség, ezt egyszerűen lesimíthatjuk például a IV.1-2 pontokban leírt konvolúcióval.

Egyetlen dologra kell figyelemmel lenni ennél az algoritmusnál, integrálható függvényekkel kell leírni a spektrum alakját. Márpedig az  $\exp(-x^2/2)$  Gauss-függvény nem integrálható, azonban nagyon jól közelíthető integrálható függvénnyel. A szakirodalomban [93,102] több helyen idézik és alkalmazzák az

$$f(x) = \frac{4 \exp(a \cdot x)}{(1 + \exp(a \cdot x))^2} \quad (5.20)$$

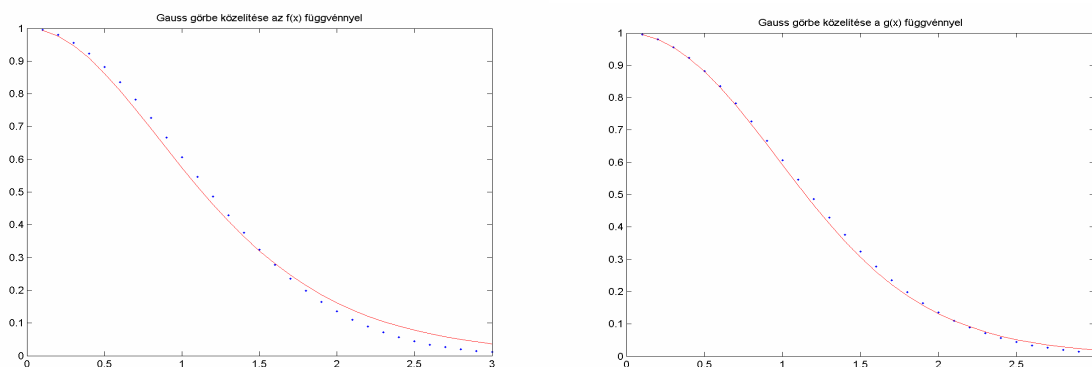
közelítést. Én azonban megadtam egy jobb approximációt szolgáltató függvényt, amely a

$$g(x) = \frac{a_1}{a_2 + \operatorname{ch}^2(a_3 x)} \quad (5.21)$$

paraméteres alakból kapható, ha ebben az ismeretlen paramétereket meghatározzuk. Szükséges feltétel, hogy  $g(0) = 1$  legyen. Ebből következik, hogy  $a_1 = a_2 + 1$ . Ha azt szeretnénk, hogy  $g(x)$  viszonylag egyszerű primitív függvénnyel rendelkezzen, akkor  $a_2 = 1$  jó választás, ahonnan  $a_1 = 2$ , így egyetlen feladat marad  $a_3$  illetve hasonlóképpen (5.20)-ban az „a” paraméter meghatározása. Tulajdonképpen az

$$\left\| f(x) - \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \right\|^2 \rightarrow \min \quad \text{illetve a} \quad \left\| g(x) - \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \right\|^2 \rightarrow \min \quad (5.22)$$

szélsőérték probléma megoldása feladat. Ezek megoldhatóak az V.1. pontbeli elvi alapokon, de egyszerűbben is, hiszen mindössze egy paramétertől függenek, melynek értéke nyilván benne van pl. a  $[0, 2]$  intervallumban. Így nem kell mást tennünk, mint az említett intervallumból kellően sűrűn választva a paramétereket, mindegyikre kiszámítjuk az eltérések normáját, és azt a paramétert választjuk optimális megoldásnak melyre ez az eltérés a legkisebb. Ilyen számításokkal az adódik hogy az optimális esetben  $a = 1,5600$  illetve  $a_3 = 1,0000$ . A két közelítő függvényt a Gauss-görbével együtt az V.5. ábra a) és b) részén ábrázoltuk.



a) b)  
**V.5. ábra. Gauss görbe (folytonos görbe) approximációja**  
**a) az  $f(x)$ ; b) a  $g(x)$  függvénnyel (pontozott görbék)**

Vizuálisan is látható, hogy a  $g(x)$  pontosabb közelítés, de számszerűvé is tesszük az eltérést. Ha csak háromszoros szórásnyi intervallumot tekintünk – többre nincs szükség, hiszen a centrumtól nagyobb távolságban a háttér illetve a Compton-kontinuum elnyomja a Gauss-görbét –, a két függvény eltérésének normája rendre 0,1375 illetve 0,0588, tehát a  $g(x)$  függvény egy nagyságrenddel jobban közelíti a Gauss-eloszlást. Ez a közelítés egy válaszfüggvény generálása szempontjából kielégítően pontosnak tekinthető.

A  $g(x)$  közelítést azért kerestük, hogy integrálható függvényt kapjunk. Azonos átalakításokkal azt kapjuk, hogy

$$g(x) = \frac{2}{1 + \operatorname{ch}^2(x)} = \frac{4}{3 + \operatorname{ch}(2x)} = \frac{8}{6 + \exp(2x) + \exp(-2x)} \quad (5.23)$$

ez pedig a  $t = \exp(2x)$  helyettesítéssel racionális törtfüggvény alakot ölti, ami pedig standard módszerekkel integrálható. Ha alkalmazzuk az  $\alpha = -3 + 2\sqrt{2}$  és  $\beta = -3 - 2\sqrt{2}$  jelöléseket a nevező gyökeire, akkor  $g(x)$  primitív függvénye az alábbi formába írható:

$$\int g(x) dx = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot \ln \left| \frac{\exp(2x) - \alpha}{\exp(2x) - \beta} \right| + C \quad (5.24)$$

(5.24) alapján pedig már igen egyszerűen leírható a Gauss-görbét igen jó közelítéssel generáló Monte-Carlo algoritmus. Esetünkben egy véletlen szám azon energiaérték, amilyen energiájúnak észleljük a fotont a detektálás során. Ez a „ $v$ ” véletlen szám pedig, bevezetve a  $\gamma = (1 - \alpha)/(1 - \beta)$  jelölést és alkalmazva az (5.24) formulát, a következő hányadossal egyenértékű:

$$v = \frac{\int_0^E g(x) dx}{\int_0^\infty g(x) dx} = \frac{1}{\ln(\gamma)} \cdot \ln \left| \frac{\exp(2E) - \alpha}{\exp(2E) - \beta} \cdot \gamma \right| \quad (5.25)$$

amelyre már  $v \in [0, 1]$ . Ha az (5.25) összefüggést invertáljuk, azaz kifejezzük  $E$ -t, akkor az

$$E = \frac{1}{2} \cdot \ln \left| \frac{\beta \cdot \exp(v \cdot \ln \gamma) - \alpha \gamma}{\exp(v \cdot \ln \gamma) - \gamma} \right| \quad (5.26)$$

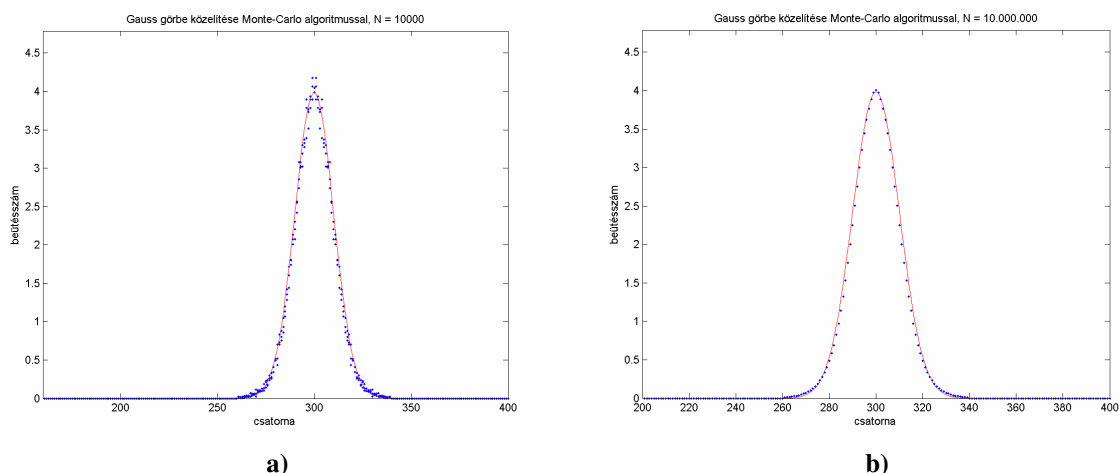
összefüggést kapjuk. Az (5.26) összefüggés birtokában az eljárás a következő. Definiálunk egy  $\mathbf{g} \in \mathfrak{R}^m$ ,  $\mathbf{g} = \mathbf{0}$  vektort, ahol  $m$  a csatornák száma, ezután generálunk egyenletes eloszlással egy  $v \in [0, 1]$  véletlen számot, kiszámítjuk  $E$  értékét és az  $E$ -energiához tartozó csatorna tartalmát 1 egységgel növeljük. Ezt a műveletet ismételjük sokszor, tipikusan  $10^4$ - $10^7$  alkalommal. Ezzel az eljárással megkapjuk az V.5. ábrán látható fél Gauss-görbét.

Ezek után ha egy  $E_f$  centrumú ( $E_f = \text{fotoenergia}$ ) és  $\sigma$  szórású Gauss-görbét szeretnénk generálni, akkor kell generálnunk még egy  $v_1$  véletlen számot, amely azonban csak a  $-1$  és  $+1$  értékeket veszi fel, és az előzőekben kapott  $E$  energiaértékkel az  $E_f + v_1 \cdot \sigma \cdot E$  energiájú cellában növeljük meg egy egységgel a cellatartalmat. A véletlen számok generálásával gyakorlatilag fotonokat szimulálunk. A Gauss-görbe esetén egy jó közelítéshez nagyságrendileg legalább  $10^5$ - $10^6$  foton szükséges, ha ehhez hozzávesszük még a Compton-tartomány szimulációját és felidézzük, hogy a válaszfüggvénynek 256-512-1024 oszlopa van, és azt, hogy ezt a műveletsort minden oszlop esetén el kell végezni, akkor világos, hogy az algoritmus sok számítást igényel. De nyilvánvaló, hogy ezt a válaszfüggvényt csak egy alkalommal kell előállítani, utána minden egyes dekonvolúciós számítás esetében már rendelkezésre áll. Ebből az időből némileg



lefaraghatunk, ha tekintetbe vesszük, hogy a Gauss-görbe szimmetrikus, így elég csak az egyik felét generálni, a másik fele már tükrözéssel kapható. Így legalább a csúcsonál megspóroljuk a szükséges véletlen számok generálásának a felét, ami számottevő időtartam lehet.

Az V.6. ábrán látható, hogy hogyan közelít egyre jobban, és hogyan simul ki egyre jobban az  $m = 300$ ,  $\sigma = 10$  paraméterekkel adott Gauss-görbe Monte-Carlo kóddal kapott approximációja. Az a) ábrán  $10^4$  db véletlen számot generáltunk – a görbe egyik feléhez – ez, még meglehetősen rossz közelítés, nagy a „szórás” a görbe körül, ellenben a b) ábrán, ahol a szimulált fotonok száma  $10^7$  db, a közelítés – egy válaszfüggvény szempontjából – tökéletesnek tekinthető.



**V.6. ábra. Gauss-görbe generálása Monte-Carlo algoritmussal**  
a)  $N = 10^4$  db; b)  $N = 10^7$  db foton szimulációjával

Tájékoztatóképpen közöljük, hogy a b) ábra esetén a számítási idő  $\approx 50$ s úgy, hogy csak a fél görbét generáltuk. Innen következtethetünk a teljes válaszfüggvényhez szükséges összes számítási idő nagyságrendjére, de ismét hangsúlyozzuk, hogy ezt a számítást csak egyszer kell elvégezni.

## V.2.2. A COMPTON-CONTINUUM KÖZELÍTÉSE MONTE-CARLO ALGORITMUSSAL

Ahhoz, hogy a Compton-tartományt is le tudjuk írni a válaszfüggvényben, mindenekelőtt a Klein-Nishina formulát (a továbbiakban „KN-formula”) kell tanulmányoznunk [1,2,4]. Ez a függvény írja le analitikus módon az energiaátadás folyamatának differenciális hatáskeresztmetszetét, tehát annak valószínűségét, hogy a foton által a Compton-szórás során átadott energia adott érték. Ez a formula a következő:

$$\text{KN}(E) = \frac{d\sigma}{dk_e} = \frac{\pi r_e^2}{k^2} \left\{ 1 + \left[ 1 - \frac{k_e}{k(k - k_e)} \right]^2 + \frac{k_e^2}{k(k - k_e)} \right\} \quad (5.27)$$

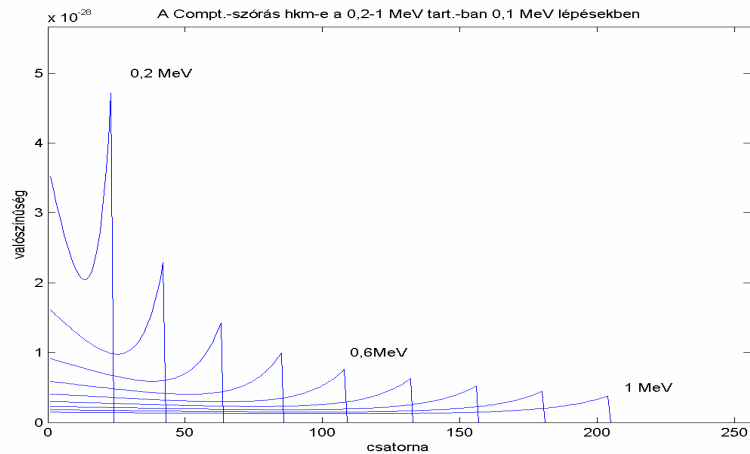
Ahol  $r_e$  az elektron sugara,  $E$  a foton energiája,  $E_e$  az elektronnak átadott energia,  $k = E/mc^2$ ,  $k_e = E_e/mc^2$ . Ennek a formulának, vizsgálataink szempontjából, két hátránya van. Egyrészt az, hogy analitikusan nehezen kezelhető, márpedig a Monte-Carlo-kód kivitelezéséhez egyszerűen integrálható függvényre van szükség. Ennek folyamánya az, hogy a KN-formulát elsősorban grafikusán fogjuk vizsgálni, azt a kérdést vetjük fel, hogy milyen egyszerű szerkezetű, analitikusan könnyen kezelhető függvénnyel lehet a KN-formula által adott görbét közelíteni, de nem a legkisebb négyzetek feladata szerint. Van azonban az összefüggésnek egy másik hátránya – amely fizikai szempontból nagyon lényeges –, hogy ez a formula csak arra az esetre szolgáltatja a hatáskeresztmetszetet, amikor a szcintillációs kristályban minden foton esetében **pontosan egyszer következik be Compton-szórás**. Mivel a kísérletileg felvett spektrumok Compton-tartománya – különösen a 0–1 MeV intervallumban – jelentősen eltér ettől az elméleti eredménytől, arra lehet következtetni, hogy a Compton-szórások száma több mint egy. Ezt a torzulást az elmélet is alátámasztja, bár analitikus formulák nem léteznek a kapott Compton-görbe leírására, csak algoritmusok, amelyekkel azt generálni lehet [36]. Ez a módosulás nyilván több paraméter függvénye, többek közt függ a detektor méretétől és a foton energiájától is. A többszörös szóródásnak köszönhetően az elméletileg jóslott függvény torzul, megtartja jellegét de a tapasztalatok szerint minél több a szóródások száma, a görbe annál jobban ellapul és a csúcsok annál kevésbé magasak [34, 37]. A mérések tanúsága szerint ez a jelenség elsősorban a 0–1 MeV tartományban dominál,  $E > 1\text{MeV}$  esetén az elméleti függvénykapcsolat sokkal jobb közelítés, mint alacsony energiákon. Ennek a tapasztalatnak a következményeképpen a Compton-tartomány vizsgálatát és közelítését két lépésben végezzük el, külön foglalkozunk az alacsony energiák  $0 < E < 1\text{ MeV}$  tartományával és külön az  $1\text{MeV} < E$  energiartománnyal.

### V.2.2.1. A COMPTON-CONTINUUM KÖZELÍTÉSE AZ $E < 1\text{ MeV}$ ENERGIATARTOMÁNYBAN

Alacsony energiák esetén a KN-formula által megadott hatáskeresztmetszet energiatartományfüggése az V.7. ábrán látható különböző foton-energiák esetén az  $E_c$  Compton-él –ig. A Compton-élt az V.2.2. pontban bevezetett jelölések alkalmazása esetén az alábbi formula szolgáltatja:

$$E_c = E \cdot \frac{2k}{1 + 2k} \quad (5.28)$$

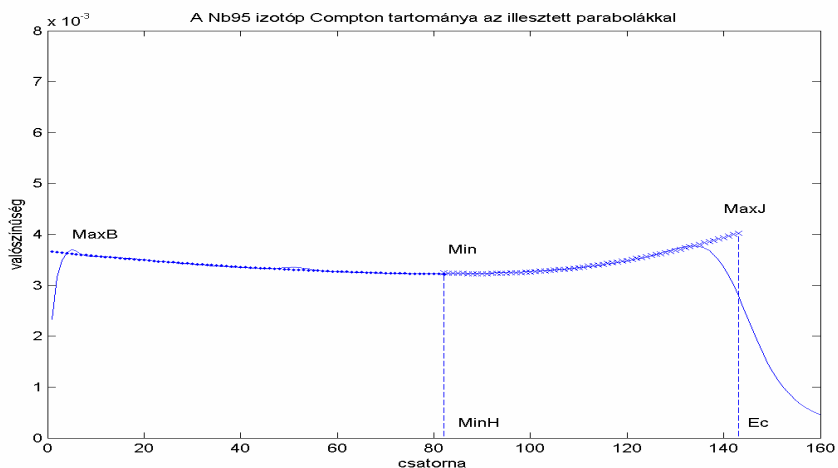
Az ábra alapján elfogadhatónak tűnik az az álláspont, hogy a valószínűség eloszlás egy „aszimmetrikus parabolával” közelíthető. Pontosabban az eloszlásnak van egy energiatartományfüggő minimuma, ennek két oldalán egy-egy fél parabolával lehet közelíteni a görbét. Azonban, mint azt az előző pontban említettük, nem ezeknek az elméleti görbéknek az approximációja a feladat, hanem a méréssel kapott spektrumok vizsgálata vezet célra.



**V.7. ábra. Az energiaátadás differenciális hatáskeresztmetszete a Klein-Nishina formula alapján a 0,2–1 MeV tartományban 0,1 MeV lépésközzel, egy 512 csatornás detektor esetén.**

Tekintett arra, hogy a rendelkezésünkre álló izotópok között nem volt olyan, amelyik karakteres Compton-tartományt szolgáltatott volna, ezért – hasonlóan a „csúcs per összes” arányt megadó függvény kalibrációjához –, sajnos csak a [www.nucleonica.net](http://www.nucleonica.net) weboldalon előállított spektrumokra tudunk támaszkodni. (Én az értekezésemben a módszert szeretném leírni, aminek hatékonyságát az adott esetben illusztrálni fogom. Ha egy alkalmazó kellő számú és minőségű spektrummal rendelkezik, akkor a következőkben leírt módszer változtatás nélkül alkalmazható.)

Az eljárás ezután a következő. Válasszunk ki egy olyan szcintillációs gamma-spektrumot, amely egyetlen fotocsúcsot tartalmaz és a foton energiája a 0–1 MeV tartományban van. Ez után keressük meg a Compton-continuum minimumhelyét, majd ettől jobbra és balra egyaránt illesztünk egy-egy fél parabolát a tartomány kijelölt darabjaira – természetesen úgy, hogy az illesztésre kijelölt tartományokban már ne legyenek benne a két végen megjelenő lekerekített részek –, majd a kapott függvényeket extrapoláljuk bal oldalon 0 MeV energiáig, jobb oldalon pedig az  $E_c$  Compton-él-ig. Egy ilyen illesztés látható az V.8. ábrán.



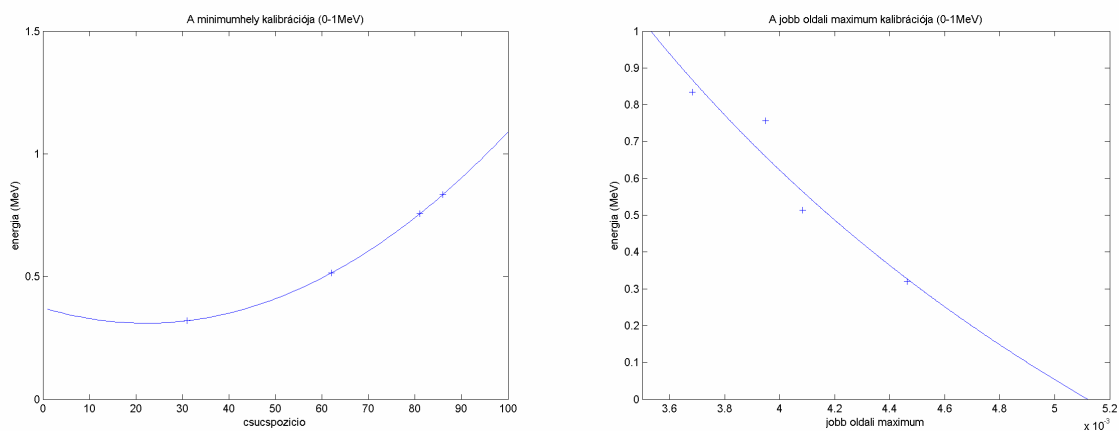
**V.8. ábra. Az ábrán a Nb95 izotóp 512 csatornás detektorra modellezett elméleti spektrumának Compton-tartománya látható (folytonos görbe), illetve az illesztett parabolák (pontosított görbe a bal oldalon és 'x' jelekkel rajzolt görbe a jobb oldalon).**

Mint látható, a Compton-tartomány közelítéséhez nagyon jó választás a parabolákkal történő approximáció. Az ábrán megjelöltük azokat a paramétereket amelyekre szükségünk van ahhoz, hogy egy adott E foton energia esetén meg tudjuk rajzolni az ábrán is jelölt két fél parabolát. Ezek a következők: A Compton-tartomány minimumhelye (MinH) és minimuma (Min), továbbá az eloszlási görbe extrapolált értéke 0 MeV energiaértékre, tehát a bal oldali maximum (MaxB) és az eloszlás extarpolált értéke az  $E_c$  Compton-él-re (MaxJ), tehát a jobb oldali maximum. Ezen kívül szükség van még a görbék előállításához a  $h_1 = \text{MaxB}/\text{Min}$  és a  $h_2 = \text{MaxJ}/\text{Min}$  arányra. A számított adatokat a Cr51, Sr85, Nb95 és Mn54 izotópokra vonatkozólag a 14. melléklet tartalmazza. Az említett táblázat négy adott foton-energia esetére tartalmazza a szükséges adatokat, azonban világos, hogy a válaszfüggvény generálásához minden lehetséges energiaérték esetére szükséges ismernünk az említett adatokat. Ahhoz, hogy a válaszfüggvényt előállíthassuk, a következőt tesszük. A vizsgált négy izotóp esetére ábrázoljuk egy-egy koordinátarendszerben a MinH,  $h_1$ ,  $h_2$  és MaxJ értékek energiafüggését, majd a grafikus kép alapján egy-egy paraméterektől függő függvényt illesztünk a méréssel kapott pontokra úgy, hogy a paraméterek legjobb értékét a legkisebb négyzetek feladatának megoldásával, iterációval határozzuk meg, pontosan úgy ahogyan azt az V.1.1–4. pontokban tettük. Ennek a négy mennyiségnek az ismerete pontosan elegendő a két fél-parabola előállításához.

Elsőként a Compton-tartomány minimumhelyét kalibráljuk. A mérési eredmények alapján ebben az esetben is alkalmas választásnak tűnik a másodfokú függvény. Az E energia és a MinH minimumhely kötött tehát

$$E(\text{MinH}) = p_1 + p_2 \cdot \text{MinH} + p_3 \cdot \text{MinH}^2 \quad (5.29)$$

alakú függvénykapcsolatot tételezünk fel. Mivel a paraméterekben ez egy lineáris illesztési feladat, ismét az (5.5) iterációt alkalmazhatjuk. A mérési eredmények és az iterációval illesztett görbe az V.9.a) ábrán látható.



a)

b)

**V.9. ábra. A Compton-tartomány a) minimumhelyének; b) jobb oldali maximumának kalibrációja rendre másodfokú függvény illetve hiperbola illesztésével.**

A kapott paramétereket az V.5. táblázat tartalmazza.

Paraméter	p <sub>1</sub>	p <sub>2</sub>	p <sub>3</sub>
Illesztéssel kapott érték	3,7307·10 <sup>-1</sup>	-5,7018·10 <sup>-3</sup>	1,2867·10 <sup>-4</sup>

V.5. táblázat: A Compton-minimum helyének kalibrált paraméterei

A Compton-tartomány Compton-él-éhez, tehát az E<sub>c</sub>-hez tartozó jobb oldali maximuma jobban közelíthető egy hiperbolával. Az illesztendő függvényt

$$E(\text{MaxJ}) = s_1 + \frac{s_2}{\text{MaxJ}} \quad (5.30)$$

alakban vesszük fel, amely ismét lineáris illesztési feladat. A mérési adatok és az illesztett görbe az V.9.b) ábrán látható. A kapott paramétereket pedig az V.6. táblázat tartalmazza.

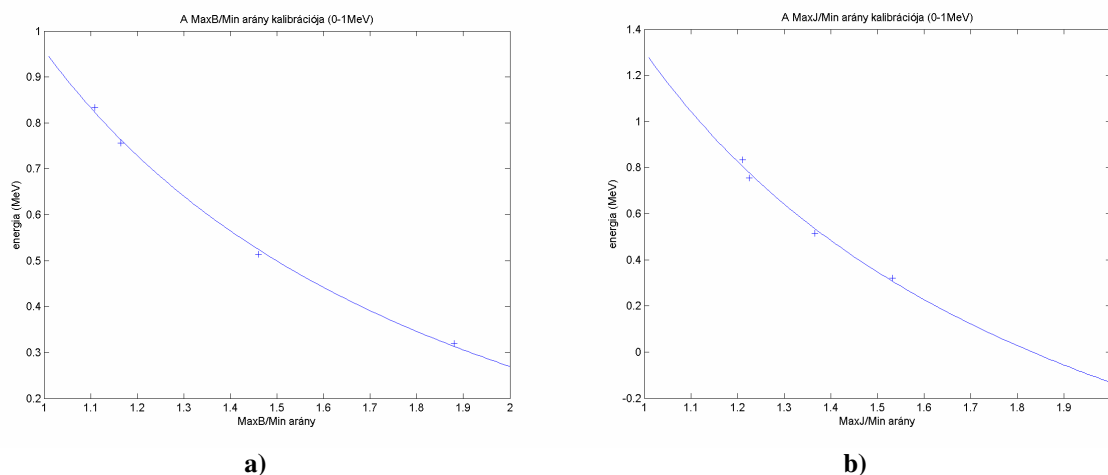
Paraméter	s <sub>1</sub>	s <sub>2</sub>
Illesztéssel kapott érték	-2,2240	1,1390·10 <sup>-2</sup>

V.6. táblázat: A Compton-tartomány jobb oldali, Compton-él-éhez tartozó maximum helyének kalibrált paraméterei

Szükségünk van még a h<sub>1</sub> = MaxB/Min és a h<sub>2</sub> = MaxJ/Min arányok kalibrációjára is. Ezekre az arányokra is hiperbolát illesztettünk az alábbi alakban:

$$E(h_1) = q_1 + \frac{q_2}{h_1}; \quad E(h_2) = r_1 + \frac{r_2}{h_2} \quad (5.31-5.32)$$

Az V.10. a) és b) ábrákon láthatóak a méréssel-számítással kapott adatok és az illesztett függvények.



V.10. ábra. A Compton-tartomány MaxB/Min illetve a MaxJ/Min arányának kalibrációja

Az V.7. táblázat tartalmazza az illesztéssel kapott függvények paramétereit. Birtokunkban van tehát az összes szükséges adat, melyek segítségével a 0–1 MeV tartományban generálhatjuk a Compton-tartományt. Egy Monte Carlo algoritmust szerkesztünk, melynek segítségével a tartományt leíró görbe véletlen-szám generálással előállítható, akár csak a foto-csúcs Gauss-

görbéje. Mivel azonban a tartományt két parabolával írtuk le ezért a Monte Carlo kódot is két részben valósítjuk meg. A logika pontosan ugyanaz mint amit az V.2.1. pontban követtünk.

$h_1 = \text{MaxB/Min}$	$q_1$	$q_2$
Illesztett paraméterek	$-4,1991 \cdot 10^{-1}$	1,3785
$h_2 = \text{MaxJ/Min}$	$r_1$	$r_2$
Illesztett paraméterek	-1,5694	2,8764

**V.7. táblázat: A Compton-tartomány MaxB/Min illetve a MaxB/Min arányának illesztéssel kapott paraméterei**

Az adott szituációban egyszerűbb a parabolát teljes négyzetté kiegészített alakba írni: általánosan  $f(x) = a \cdot (x - b)^2 + c$ . Ha azonban erre alkalmazzuk a gondolatmenetet, transzcendens egyenletre jutunk a  $c$  konstans miatt. Mivel pedig a  $c$  csak egy függőleges irányú eltolás, a számításokat és a Monte Carlo algoritmust csak az  $f(x) = a \cdot (x - b)^2$  függvényre vonatkozólag végezzük el, és az eredményt eltoljuk függőlegesen felfelé  $c$ -vel. Ennek a műveletnek további előnye, hogy azonos „simaságú” görbe előállításához akár 2 nagyságrenddel kevesebb véletlen számot kell generálnunk. Ezzel javítjuk az előállított görbe minőségét és jelentős mennyiségű időt spórolunk. Ennek szemléletes igazolásához javasoljuk összehasonlítani az V.11. és V.13. ábrákat, melyeken rendre  $10^4$  és  $10^6$  db foton szimulációjával generáltuk a megfelelő görbéket.

A bal oldali tartomány esetében ismételten egy véletlen szám az az energia, amilyenek a fotont észleli a detektor. Ez pedig egyenértékű az alábbi  $[0, 1]$  intervallumba tartozó  $v_1$  véletlen számmal:

$$v_1 = \frac{\int_0^E a_1 (x - b)^2 dx}{\int_0^{\text{MinE}} a_1 (x - b)^2 dx} = \frac{\frac{a_1}{3} [(E - b)^3 + b^3]}{\frac{a_1}{3} [(\text{MinE} - b)^3 + b^3]} \quad (5.33)$$

ahol  $\text{MinE}$  a  $\text{MinH}$  minimumhelyhez tartozó energia – ha ezt nem energia egységben hanem csatorna egységben mérjük –. Ha most a nevezőben levő állandót  $C_1$  jelöli, akkor ebből kifejezhető a véletlentől függő  $E$  energiaérték:

$$E = \sqrt[3]{\frac{3C_1 v_1}{a_1} - b^3} + b \quad (5.34)$$

A jobb oldali parabola generálása esetén a detektált energia ugyancsak egy véletlen szám, amivel egyenértékű az alábbi  $[0, 1]$ -be eső  $v_2$  véletlen szám:

$$v_2 = \frac{\int_{\text{MinE}}^E a_2 (x - b)^2 dx}{\int_{\text{MinE}}^{E_c} a_2 (x - b)^2 dx} = \frac{\frac{a_2}{3} [(E - b)^3 - (\text{MinE} - b)^3]}{\frac{a_2}{3} [(E_c - b)^3 + (\text{MinE} - b)^3]} \quad (5.35)$$

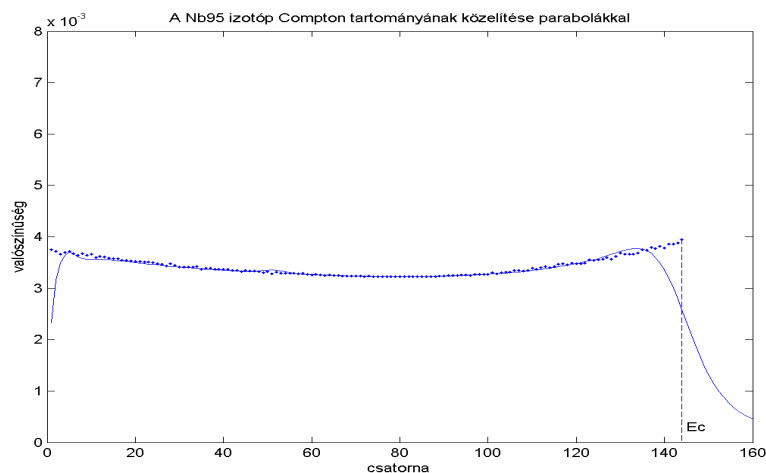
ahol  $E_c$  szokásosan a Compton-él energiája. Ha most  $C_2$  jelöli a nevezőbeli állandót, akkor a detektált energiára a következő véletlentől függő érték adódik:

$$E = \sqrt[3]{\frac{3C_2 v_2}{a_2} + (\text{Min}E - b)^3} + b \quad (5.36)$$

A paraméterek egy részét ( $a_1, a_2$ ) azért indexeltük, mert a minimumhely két oldalán a parabolák különböznek, adott foton-energia esetén két paraméterük viszont azonos, a „b” és „c” paraméter, hiszen a két parabola csúcspontja közös, így ezek indexelése elhagyható. Az (5.34) és (5.36) formulák birtokában a parabolák már generálhatók véletlen számokkal, csak egy dologra kell tekintettel lennünk. Mégpedig arra, hogy a szimulált fotonok számát vagyis a generált véletlen számokat a két másodfokú függvény adott tartományokra vonatkozó integráljai arányában osszuk el. Jelöléssel élve, a szimulált fotonok aránya legyen  $h$ , ahol  $h$ -t az alábbi hányados értelmezi:

$$h = \frac{N_1}{N_2} = \frac{\int_0^{\text{Min}E} (a_1(x-b)^2) dx}{\int_{\text{Min}E}^{E_c} (a_2(x-b)^2) dx} = \frac{a_1[(\text{Min}E - b)^3 + b^3]}{a_2[(E_c - b)^3 - (\text{Min}E - b)^3]} \quad (5.37)$$

A két fél parabolát külön-külön előállítjuk (5.34) és (5.36) szerint úgy, hogy a szimulált fotonok aránya (5.37) szerinti legyen, majd az eredményt felfelé eltoljuk  $c$ -vel. Ezzel a Compton-tartomány generálásának problémáját megoldottuk abban az esetben, ha kellő számú, minőségű és részletességű spektrum áll rendelkezésre. Az V.11. ábrán látható a Nb95 izotóp Compton-tartományának generálása két fél parabola együtteseként a fentiekben leírt Monte Carlo algoritmus felhasználásával, mindössze  $N_1 = 10^4$ ,  $N_2 = N_1/h$  számú foton szimulációja esetén.



**V.11. ábra. A Nb95 izotóp Compton-tartománya (folytonos görbe) illetve ennek generálása Monte Carlo algoritmussal, a MinH bal és jobb oldalán rendre  $N_1=10^4$ ,  $N_2 = N_1/h$  számú foton szimulációjával**

A mondottak fényében tehát a parabolák adatai a kalibrációs függvények megfordításával adódó

$$\text{MinH} = \frac{-p_2 + \sqrt{p_2^2 - 4 \cdot p_3 \cdot (p_1 - E)}}{2p_3} \quad (5.38)$$

$$\text{MaxJ} = \frac{s_2}{E - s_1}; \quad h_1 = \frac{q_2}{E - q_1}; \quad h_2 = \frac{r_2}{E - r_1} \quad (5.39-40-41)$$

formulákból számíthatók. Ezek felhasználásával a parabolák „b” csúcspontja éppen a MinH minimumhely. A MaxJ és  $h_2$  kalibrációs függvények birtokában a Min érték, tehát a parabola képletében a „c” konstans, amennyivel a generált parabolát felfelé el kell tolni, a  $\text{Min} = \text{MaxJ}/h_2$  formulával adódik. A bal oldali parabola  $a_1$  főegyütthatójának kiszámításához szükség van a MaxB értékre, amit Min és  $h_1$  ismeretében a  $\text{MaxB} = \text{Min} \cdot h_1$  formula szolgáltat. Ennek birtokában a főegyüttható az  $f(0) = a_1 \cdot b^2 + c = \text{MaxB}$  összefüggés alapján következik, hasonlóan az  $a_2$  főegyüttható az  $f(E_c) = a_2 \cdot (E_c - b)^2 + c = \text{MaxJ}$  egyenlőségből:

$$a_1 = \frac{\text{MaxB} - c}{b^2}; \quad a_2 = \frac{\text{MaxJ} - c}{(E_c - b)^2} \quad (5.42)$$

Az (5.38-5.42) összefüggések alapján az V.5-7. táblázatok adatainak felhasználásával a Compton tartomány már bármely E foto-energia esetére generálható.

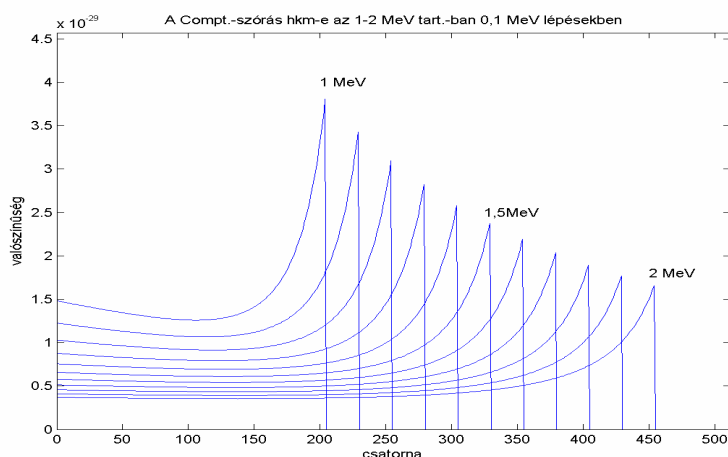
Azonban itt ki kell hangsúlyoznunk a következőt! Az V.9.a) ábra alapján világos, hogy a Compton-parabolák csúcspont-illesztését megadó másodfokú függvénynek minimuma van a  $(-p_2/2 \cdot p_3)$  helyen, az (5.29) formula szerint ennek megfelelő  $E(-p_2/2 \cdot p_3)$  energiánál kisebb foto-energia esetén a formula nem használható. Az energia kalibrációs függvényből adódik, hogy például az 512 csatornás elméleti detektor esetében ez a legkisebb csúcspozíció a 23. csatorna, amelyhez  $E = 0,309$  MeV foto-energia tartozik. Ennek a foto-csúcsnak a pozíciója a 78. csatorna. A megfelelő Compton-él energiája  $E_c = 0,173$  MeV, pozíciója pedig a 44. csatorna. Mivel az  $E = 1$  MeV foto-energiának megfelelő pozíció a 251. csatorna, az ehhez tartozó Compton-él  $E_c = 0,798$  MeV, ennek a pozíciója pedig a 201. csatorna. Ez annyit jelent, hogy a Compton-tartományt parabolával csak az [1, 44] – [1, 201] csatornaintervallumokon approximálhatjuk. Ennél kisebb energia esetén azt tesszük, hogy parabola helyett egy konstans függvénnyel közelítjük a Compton-tartományt. De ennek a közelítésnek is van egy alsó korlátja, hiszen nyilvánvaló követelmény, hogy az E foto-energiához tartozó Compton-él pozíciója egy 1-nél nagyobb csatornapozícióra essen. A minimális Compton-él pozícióhoz tartozó  $E_c$  energia az (5.10) formula szerint adódik, ebből (5.28) alapján kapjuk azt a minimális E foto-energiát, amelyhez már tartozik Compton-tartomány. Az említett esetben ez  $E = 0,0311$  MeV foto-energiát jelent a 9. csatornában, amelyhez  $E_c = 0,003375$  MeV Compton él tartozik. Ekkor van a Compton-él éppen az 1. pozícióban. Az ennél is kisebb foto-energiák esetén a válaszfüggvény kizárólag egy Gauss-görbéből áll.



Ha azonban az adatok száma kevés, kétféle módon oldhatjuk meg a problémát. Ha továbbra is ragaszkodunk a parabolák illesztéséhez, megtehetjük, hogy a  $h_1$  és  $h_2$  hányadosokat egy átlagos konstans értékkel vesszük figyelembe. Ekkor az (5.31-32) illesztéseket elhagyjuk, illetve egyetlen konstanssal helyettesítjük, a továbbiakban pedig a leírt módszer szerint dolgozunk. Extrém esetben, ha szinte semmilyen adat nem áll rendelkezésre a Compton-kontinuumra vonatkozólag, megtehetjük, hogy egész egyszerűen egy állandó függvénnyel közelítjük a tartományon a válaszfüggvényt. A KN-formulákra tekintve ez durva közelítésnek tűnik, a szakirodalom szerint azonban nem az, ugyanis [36] szerint a tartomány a szórások számának növekedésével egyre laposabbá, csaknem konstanssá válik, amit a kísérletileg felvett spektrumok is igazolnak [39]. Ebben az esetben a Compton-tartományt  $v \in [0, 1]$  véletlen számok generálásával egyszerűen az  $E = v \cdot E_c$  formula szerint tudjuk generálni.

### V.2.2.2. A COMPTON-CONTINUUM KÖZELÍTÉSE AZ $E > 1$ MeV ENERGIATARTOMÁNYBAN

Az  $E > 1$  MeV energiatartományban a KN-formula szerinti hatáskeresztmetszet grafikus képe különböző energiákra az V.12. ábrán látható.



V.12. ábra. Az energiaátadás hatáskeresztmetszete a Klein-Nishina formula szerint az 1-2 MeV tartományban 0,1 MeV lépésközzel

Az ábrából kitűnik, hogy az eloszlási görbe alacsony energiájú része egyre laposabbá válik – ez többszörös Compton-szórás esetén még inkább igaz –, míg közeledve a Compton-él-hez meredeken növekszik, így a görbe egyre inkább hiperbolikus jelleget ölt a korábbi parabolikus jelleg helyett. A szakirodalomban alkalmazzák is a „szigorú hiperbolikus” közelítést [38], mi azonban egy pontosabb közelítés mellett döntöttünk. A tapasztalatok szerint – ha még tekintetbe vesszük azt a kívánalmat is, hogy a függvény analitikusan egyszerűen kezelhető legyen –, a méréssel kapott spektrumot legjobban egy „reciprok-gyökfüggvénnyel” lehet közelíteni, melynek alakja

$$f(x) = \frac{a}{\sqrt[n]{b-x}} \quad (5.43)$$

Ismét egy véletlen szám a foton  $[0, E_c]$  tartományban detektált energiája, amely egyenértékű az alábbi,  $[0, 1]$  intervallumba eső  $v_3$  véletlen számmal:

$$v_3 = \frac{\int_0^E \frac{a}{\sqrt[n]{b-x}} dx}{\int_0^{E_c} \frac{a}{\sqrt[n]{b-x}} dx} = \frac{\sqrt[n]{(b-E)^{n-1}} - \sqrt[n]{b^{n-1}}}{\sqrt[n]{(b-E_c)^{n-1}} - \sqrt[n]{b^{n-1}}} \quad (5.44)$$

Ebből a detektált  $E$  energiát, mint véletlentől függő mennyiséget, átrendezéssel kapjuk:

$$E = b - \left[ b^{\frac{n-1}{n}} + v_3 \left( (b-E_c)^{\frac{n-1}{n}} - b^{\frac{n-1}{n}} \right) \right]^{\frac{n}{n-1}} \quad (5.45)$$

Ez a formula nem tartalmazza az „ $a$ ” paramétert. Ahhoz, hogy a generált görbe a „helyére kerüljön” alkalmazni kell egy megfelelő arányú nyújtást, amit az „ $a$ ” paraméter ad meg. Az „ $a$ ” és ezzel együtt a „ $b$ ” paraméterek értékének meghatározásához két peremfeltételt veszünk figyelembe. A tapasztalat szerint az elméleti KN-formula nagy energiákon nem torzul olyan jelentős mértékben mint kis energiákon, így nem szükséges olyan összetett paraméter illesztési számításokba belebonyolódni mint ahogyan azt a  $[0, 1]$  MeV intervallumban tettük, hanem felhasználhatjuk a KN-formula által szolgáltatott peremértékeket. Legyen a  $KN(0) = z_1$  és  $KN(E_c) = z_2$ . Ezekkel a jelölésekkel a kérdéses paraméterekre vonatkozó peremfeltételek az alábbiak:

$$\frac{a}{\sqrt[n]{b}} = z_1; \quad \frac{a}{\sqrt[n]{b-E_c}} = z_2 \quad (5.46)$$

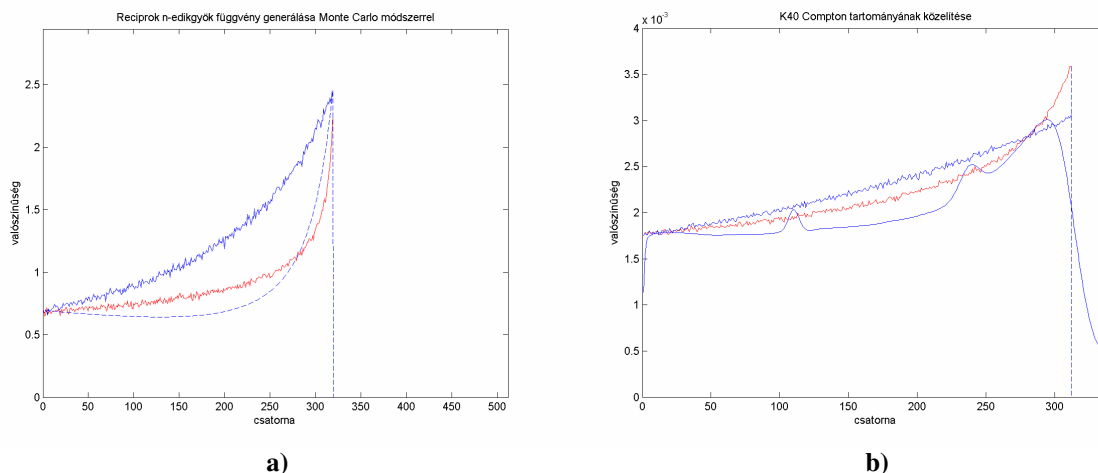
Ha most bevezetjük az  $\alpha = (z_2/z_1)^n$  egyszerűsítő jelölést, akkor az inverz formulák, tehát a hiányzó paraméterek a következők:

$$b = \frac{\alpha \cdot E_c}{\alpha - 1}; \quad a = z_1 \cdot \sqrt[n]{b} \quad (5.47)$$

Az (5.47) birtokában az (5.45) formula már alkalmas arra, hogy segítségével  $n$ -edik gyökfüggvényt generáljunk egy Monte Carlo algoritmus keretében.

Az V.13.a) és b) ábrán illusztráltuk a módszert: látható az elméleti görbe, a K40 izotóp spektruma ( $E = 1,46$  MeV), a MC-közelítés – a tapasztalat szerint legjobb – reciprok negyedek-gyök függvényel, és az összehasonlítás kedvéért szerepel az ábrán a szakirodalmi hiperbolikus közelítés is. Az ábra alapján megállapíthatjuk, hogy mind az elméleti esetben, mind pedig a méréssel kapott spektrum esetében a Compton-tartomány jobb közelítését adja a reciprok negyedek-gyök függvény, mint a „közönséges” hiperbola, így a válaszfüggvény előállításánál ezt fogjuk alkalmazni. (Világos, hogy az (5.40) formula  $n = 1$  esetben nem alkalmazható, így a hiperbolát nem ezzel a formulával generáltam, hanem a fentiekben leírt gondolatmenet

értelemszerű módosításával kapott összefüggések alapján. De mivel ezt nem fogom használni a válasz mátrix előállítására, nem fejtettem ki részletesen, csak a számítások eredményét illusztráltam.)



**V.13. ábra. a) A KN-formula szerinti elméleti görbe (szaggatott vonal); b) A K40 izotóp spektrumának Compton-tartománya (folytatos görbe) és ezek közelítése Monte Carlo kóddal,  $10^6$  db foton szimulációjával; az alsó közelítő görbe a reciprok negyedik-gyök függvény, a felső közelítő görbe a hiperbola**

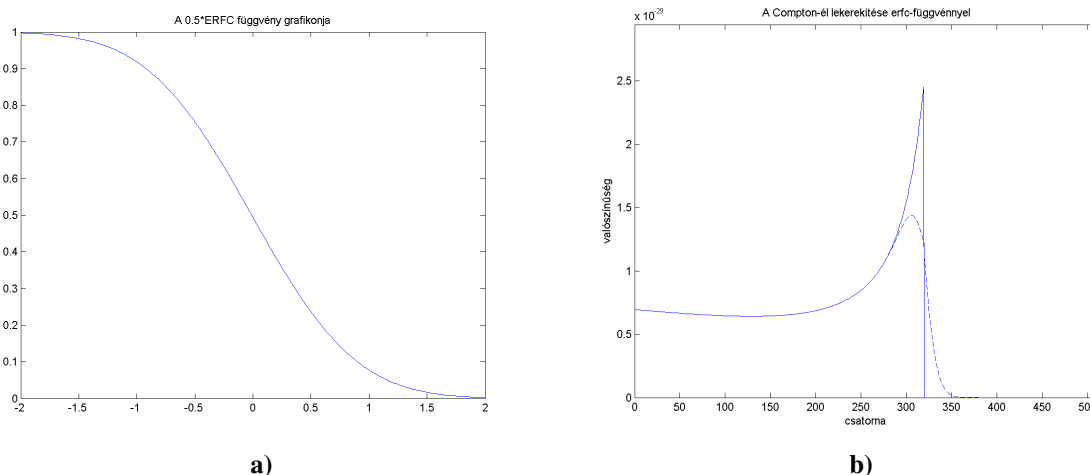
### V.2.2.3. A COMPTON-ÉL LEKEREKÍTÉSE

Végül ki kell térnem mind az  $E < 1$  MeV mind pedig az  $E > 1$  MeV energiatartományok esetén a Compton-él „lekerekítésére”, ugyanis kísérleti tapasztalatok szerint minden energián tapasztalható, hogy a Compton-él nem éles maximumként jelenik meg, mint az elméletben, hanem a statisztikus ingadozásoknak köszönhetően kiszélesedik, akárcsak a fotocsúcs. Ennek pontos leírására sem létezik egzakt analitikus formula, a szakirodalom legalább 10-féle függvényalakot használ a tapasztalati görbe közelítésére [4]. Én, annak érdekében, hogy mindegyik választott közelítő függvény esetén egyetlen függvénnyel tudjak dolgozni, és mert a szakirodalom szerint is ez az egyik legjobb közelítés [4], az  $\operatorname{erfc}(x)$  „komplementer hibafüggvényt” választottam, melynek definíciója a következő:

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt \quad (5.48)$$

Ennek a függvénynek az értékészlete a  $]0, 2[$  intervallum. Szorzófaktoroként használva a  $0,5 \cdot \operatorname{erfc}(x)$  tűnik a legjobb választásnak. Ennek a függvénynek a grafikus képe, látható az V.14.a) ábrán. A lekerekítést úgy valósítjuk meg, hogy a függvényt  $x > 0$  esetén szorzófaktoroként alkalmazzuk. A Compton-él környezetében az  $E < E_c$  energiaértékekhez tartozó csatorna tartalmát  $(1 - \alpha \cdot \operatorname{erfc}(\beta \cdot x))$ -szeresre csökkentjük, ahol  $x = (E_c - E)/\sigma$ ,  $-\sigma$  az  $E_c$  energiához tartozó szórás  $-\sigma$ , az  $E_c$  Compton-él jobb oldalán szimmetrikusan elhelyezkedő csatorna tartalmát pedig  $\alpha \cdot \operatorname{erfc}(\beta \cdot x)$ -szeresre növeljük. Így az összes beütésszám nem változik meg, voltaképpen csak a

Compton-él környezetében lévő csatornák tartalmát „átrendezzük”. A Compton-él említett módon történő lekerekítése látható az V.14.b) ábrán. Az  $\alpha$  és  $\beta$  paraméter értékét úgy választjuk meg, hogy a validálás során a generált spektrumok a legjobban illeszkedjenek a mért spektrumokhoz. Az alábbiakban az  $\alpha = 0,7$ ,  $\beta = 2/3$  értékpárt alkalmazzuk, a számítások során ezen érték-pár bizonyult a legmegfelelőbbnek.



**V.14. ábra. a) A 0,5·erfc függvény képe; b) A Compton-él lekerekítése erfc-függvénnyel: folytonos görbe a Compton-tartomány a Compton-él környezetében; a szaggatott görbe a lekerekített Compton-él**

### V.2.3. SZCINTILLÁCIÓS DETEKTOR VÁLASZ MÁTRIXÁNAK ELŐÁLLÍTÁSA

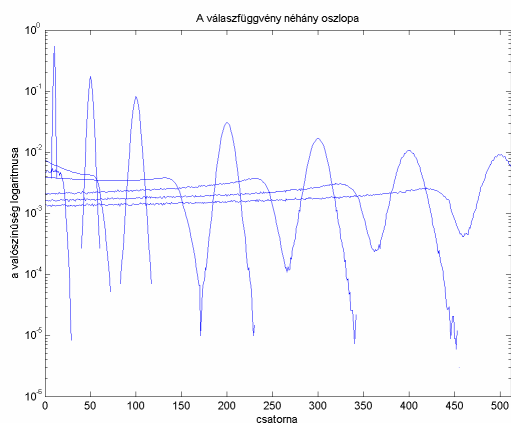
Adott szcintillációs detektorhoz a válasz mátrix előállítására a szakirodalomban több módszert alkalmaznak [100-109]. Én az V.1. pont kalibrációinak birtokában valamint az V.2.1. és V.2.2. pontban a Compton-tartománnyal kapcsolatosan leírtak szerint már magától értetődőnek mondható módon állítottam elő a válasz mátrixot. A detektor választ jelentő diszkrét valószínűség eloszlást annyi esetben állítom elő ahány csatornája van a detektornak. Az energia kalibrációból kiderül, hogy mekkora az a maximális energia amelyet a detektor mérni képes. Ezt az energiatartományt felosztom annyi intervallumra ahány csatornája van a detektornak, de nem lineárisan, hanem az energia kalibrációs függvénynek megfelelően, majd minden intervallum középértékének megfelelő gamma energiához generálok egy választ, egy diszkrét eloszlást. Ezen oszlopok együttese adja a válasz mátrixot. Az eljárás az alábbi:

1. Az V.1.2. pontbeli energia kalibráció, tehát az (5.10) és (5.11) formula segítségével meghatározzuk a kapcsolatot az energiaértékek és a csatornák között. (Mellékeredményként adódik a detektor méréshatára továbbá az is, hogy egy-egy csatorna mekkora energiatartománynak felel meg.) Ha „n” a detektor csatornáinak száma akkor a válaszfüggvénynek n db oszlopa van, mindegyikhez tartozik egy impulzus válasz. Kiválasztjuk a j-edik csatornát és a kalibrációs függvény birtokában ezt a csatornapozíciót átkalkuláljuk energiára MeV egységben.

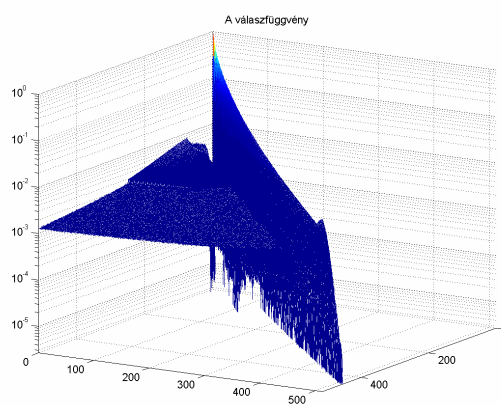
2. A „csúcs per összes” arány kalibrációjának birtokában az V.14. formula szerint minden energiaérték esetén tudjuk, hogy az összes beütésszám azaz az összes szimulált fotonok számának hányad része tartozik a teljes-energia csúcshoz. Ez az arány  $\varepsilon(E)$ .
3. Határozzuk meg, hány véletlen számot generálunk, azaz hány fotont szimulálunk a válasz mátrix egy oszlopának előállításához. Ez jellemzően  $N = 10^6$ - $10^7$  legyen. Ennyi lépésből áll az a ciklus amely adott E energia esetén előállítja a detektor válaszát.
4. Generáljunk egy  $v_0 \in [0, 1]$  véletlen számot (ezt ismételjük N lépésben). Ha  $v_0 < \varepsilon(E)$  akkor a fotocsúcsot jelentő Gauss görbét generáljuk ha  $v_0 > \varepsilon(E)$  akkor pedig a Compton tartományt.
5. A Gauss-görbe generálásához szükség van az V.1.3. pontban leírt szórás-kalibrációra. Az V.2.1. pontban leírt módon, összesen  $\varepsilon(E) \cdot N$  db véletlen számmal generálunk egy Gauss-görbét, melynek szórását az V.12. formula szolgáltatja.
6. A többi  $(1 - \varepsilon(E)) \cdot N$  db véletlen számmal a Compton-tartományt állítjuk elő két különböző esetben:
  - a) Ha  $E < 1$  MeV akkor az V.2.2.1. pontban részletesen kifejtett algoritmus szerint generálunk két fél-parabolát az (5.38-5.42) összefüggések felhasználásával.
  - b) Ha  $E \geq 1$  MeV akkor pedig az V.2.2. pontban leírtak szerint állítunk elő egy „reciprok negyedik-gyök” függvényt.
7. A Compton-élt lekerekítjük az V.2.2.2. pontban leírtak szerint.
8. A kapott függvényt lenormáljuk, vagyis egy alkalmas szorzóval oszloponként valószínűség eloszlást képezünk az adatsorból.
9. Az 1-8. lépéseket annyiszor ismételjük, ahány csatornája van a detektornak. Ezzel kapcsolatban felmerül az a kérdés, hogy nem elégséges-e csak azokra az energiákra előállítani a detektor válaszát amely energiák valóban léteznek, vagy esetleg azon izotópok gamma energiájára, amelyek jelenlétét ki szeretnénk mutatni. Ezzel ugyanis időt takarítunk meg és csökkentjük a számítások mennyiségét. A tapasztalataim sajnos azt mutatják, hogy ha ilyen részben feltöltött válasz mátrixokra alkalmazzuk a dekonvolúciós algoritmusokat, akkor számos hamis csúcs adódik a dekonvolált megoldásban, tehát félrevezető az eredmény. Ez igaz a klasszikus módszerekre is és az általam kidolgozott algoritmusokra egyaránt.

Abban az esetben, ha a spektrumban van visszaszórási csúcs, illetve egyszeres-kétszeres kiszökési csúcs, akkor az eljárás 6. pontját módosítani kell. Ekkor a visszaszórási csúcs helyén ( $E_{vsz} = E_f - E_c$ ) továbbá az egyszeres ( $E_{k1} = E_f - 511\text{keV}$ ) illetve kétszeres ( $E_{k2} = E_f - 1022\text{keV}$ )

kiszökési csúcs helyén az 5. pontban is alkalmazott energia-kalibrációs függvény alapján generálunk foto-csúcsot, ahol  $E_f$  a foto-energia,  $E_c$  a Compton-él-hez tartozó energia. Ezeket a Gauss-görbéket hozzáadjuk a Compton-tartományt leíró görbéhez, majd a megnövekedett beütésszámoknak megfelelő aránynak megfelelően a Compton tartományt zsugorítjuk úgy, hogy az összes beütésszám végül megegyezzen azzal amennyi a csúcsok nélküli esetben volt.



a)



b)

**V.15. ábra. a) A generált válaszfüggvény 10., 50., 100., 200., 300. 400. és 500. oszlopa logaritmikus skálán; b) A teljes válaszfüggvény háromdimenziós koordináta-rendszerbeli képe logaritmikus skálán;**

Az V.15.a) ábrán illusztráltuk a generált válaszfüggvény 10., 50., 100., 200., 300. 400. és 500. oszlopának megfelelő valószínűség eloszlást. Az egyes eloszlások közötti különbség, hogy rendre az első válaszfüggvény csak egy Gauss-görbe, a második esetben a foto-csúcs mellett a Compton-tartomány egy konstans függvény, a következő két esetben két fél-parabolából áll az utolsó két esetben pedig egy-egy reciproknegyedik-gyök függvény. Az V.15.b) ábrán pedig a teljes válaszfüggvény háromdimenziós koordináta-rendszerbeli képét láthatjuk. (Annak érdekében, hogy a görbék egyetlen koordináta-rendszerben jól láthatóak legyenek, a z-tengelyen logaritmikus skálát választottam).

Ugyanezzel az algoritmussal állítottam elő a három detektorra vonatkozólag is a válaszfüggvényt. Terjedelmi korlátok miatt ezeket már nem illusztrálom ábrákkal. Ezeket a következő pontban mérésrel kapott gamma-spektrumok dekonvolúciójára, izotópazonosításra alkalmazom. Ezeket a számítási eredményeket fogom bemutatni.

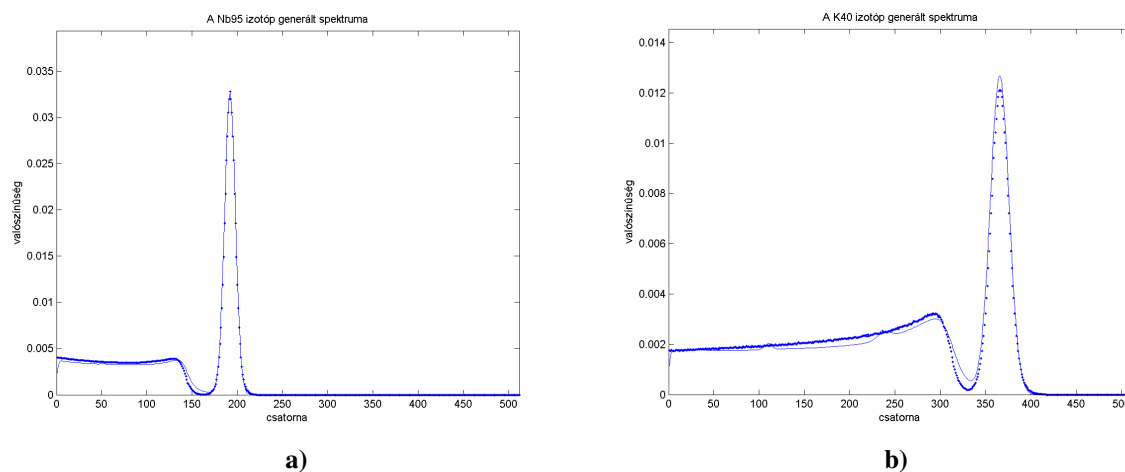
### **V.3. IZOTÓPAZONOSÍTÁS DEKONVOLÚCIÓVAL, A DEKONVOLÚCIÓS ALGORITMUSOK ÉS VÁLASZ MÁTRIXOK EGYÜTTES ALKALMAZÁSA**

Ebben a pontban összefoglaló módon alkalmazom a II. pontban kidolgozott dekonvolúciós algoritmusokat, és az V. pontban leírt módszerrel generált válaszfüggvényeket. Ezzel egyrészt illusztrálom azt, hogy a dekonvolúciós módszerek hatékonyan alkalmazhatóak, de ezzel együtt azt is bizonyítom, hogy az előző pontban leírt algoritmussal generált válaszfüggvény alkalmas a kitűzött feladat megoldására.

### V.3.1. ELMÉLETILEG GENERÁLT SPEKTRUMOK DEKONVOLÚCIÓJA

A leírt módszerrel kapott válaszfüggvény validálása úgy történik, hogy a méréssel kapott, normált spektrumokra illesztjük a Monte Carlo kóddal kapott válaszfüggvényt. Az összehasonlítást két lényegesen különböző esetre végezzük el.

Egyrészt választottam olyan spektrumokat amelyek egyetlen foto-csúcsot tartalmaznak. Ebben az esetben ugyanis a normált spektrum egyszerűen a válaszfüggvény adott foto-energiához tartozó oszlopával kell, hogy megegyezzen.



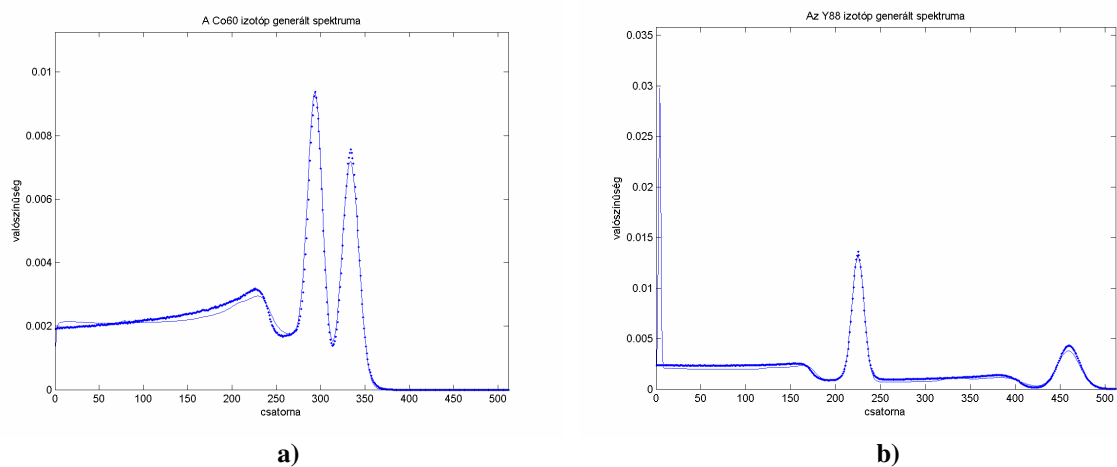
**V.16. ábra. a) A Nb95 izotóp normált spektruma (folytonos görbe) és a generált válaszfüggvény (pontvonal); b) A K40 izotóp normált spektruma (folytonos görbe) és a generált válaszfüggvény (pontvonal);**

Példaképpen bemutatok egy olyan izotópot amelynek 1 MeV-nél kisebb, és egy olyat amelynek 1 MeV-nél nagyobb a foto-energiája. A fentiek szerint az első esetben parabola-párt, a második esetben reciprok negyedik-gyök függvényt alkalmaztam a Compton-tartomány leírására. Az V.16.a) ábrán a Nb95 ( $E = 0,765$  MeV), a b) ábrán pedig a K40 ( $E = 1,46$  MeV) normált spektruma látható és a generált válaszfüggvény.

Másrészt ellenőrizhetjük a generált válaszfüggvény pontosságát úgy is, hogy választunk olyan izotópot, amelyek spektrumában több foto-csúcs van. Ebben az esetben táblázatból [1, 2] vesszük az egyes foto-energiák előfordulásának valószínűségét, és a válaszfüggvény spektrumában szereplő foto-energiáknak megfelelő oszlopait a valószínűségeknek megfelelően súlyozzuk és normáljuk, majd az így kapott összeget vetjük össze az ugyancsak normált spektrummal. Az V.17. a) és b) ábrán látható rendre a Co60 izotóp ( $E_1 = 1,173$  MeV,  $E_2 = 1,332$  MeV; a bomlási valószínűségek rendre 0,9986; 0,9998) és az Y88 izotóp ( $E_1 = 0,014$  MeV,  $E_2 = 0,898$  MeV,  $E_3 = 1,836$  MeV; a bomlási valószínűségek rendre 0,5250; 0,9400; 0,9936) ezen módszerrel előállított normált spektruma, illetve a mért normált spektrum.

Az V.16-17. ábrák alapján kijelenthetjük, hogy az V.2.1. és V.2.2. pontokban részletesen leírt, és a fentiekben összefoglalt Monte Carlo algoritmus – egyszerűsége ellenére – igen jó közelítése a méréssel kapott spektrumoknak. Így – tekintettel a méréssel kapott spektrumok

korlátozott számára – elfogadjuk az V.1-7. táblázatokban foglalt paraméterek értékét és a leírt algoritmust tetszőleges foto-energia esetére, a válaszfüggvényt tehát azzal az algoritmussal állítjuk elő amellyel az V.16-17. ábrákon illusztrált válaszfüggvényeket is generáltuk.



**V.17. ábra. a) A Co60 izotóp normált spektruma (folytonos görbe) és a generált válaszfüggvények súlyozott átlaga (pontvonal); b) Az Y88 izotóp normált spektruma (folytonos görbe) és a generált válaszfüggvények súlyozott átlaga (pontvonal);**

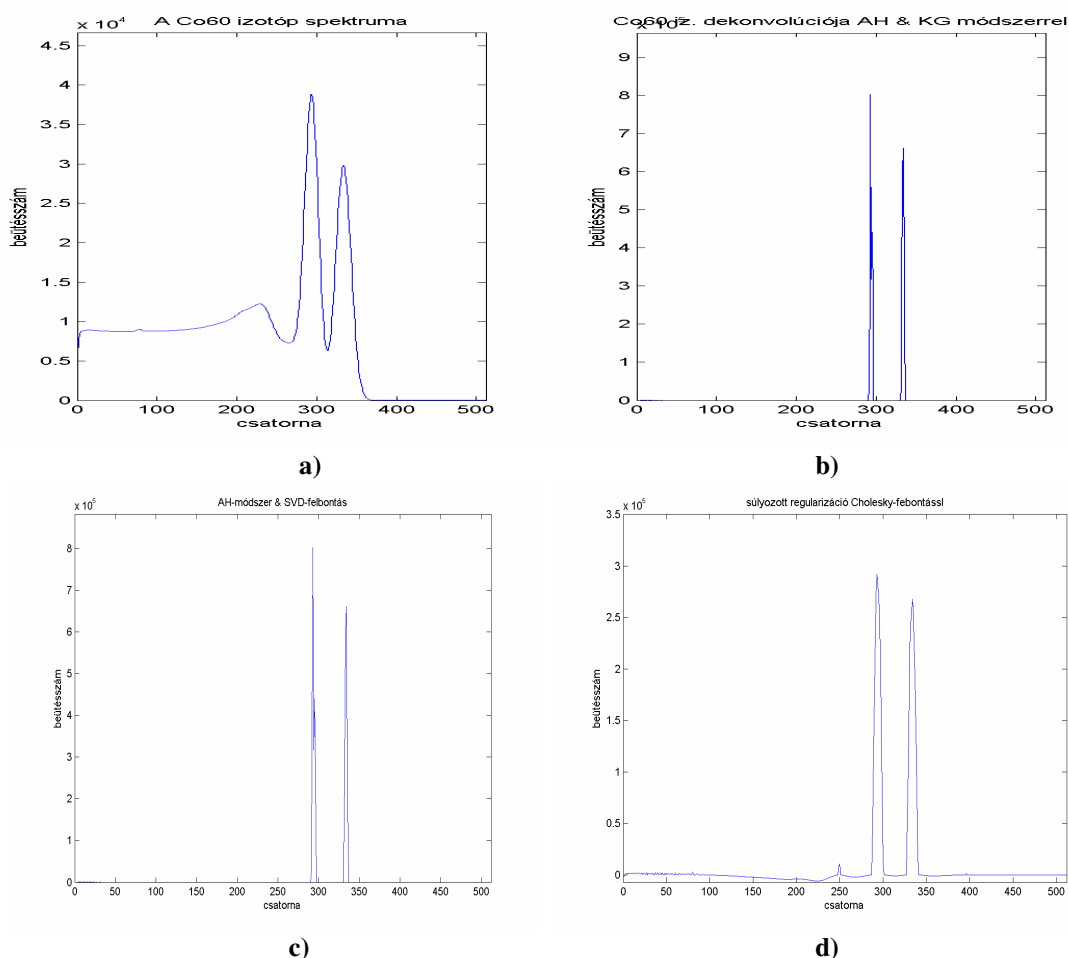
A válaszfüggvény validálását – korlátozott számú spektrum felhasználásával –, az V.16-17. ábrák tanúsága szerint elvégeztük, de az igazi próbája az algoritmus-rendszernek természetesen az, hogy segítségükkel izotópazonosítás hajtható végre. Szeretnék rámutatni arra, hogy értekezésemnek éppen ez volt a fő célja. A dekonvolúciót elsőként az elméleti esetre mutatom be, majd a méréssel kapott spektrumok dekonvolúcióját mutatom be. Terjedelmi korlátok miatt nem részletezem mindhárom detektor esetében a számítások eredményét, hiszen ezek között már nincs elvi különbség, példaképpen az IH-111L detektorral mért spektrumokat vizsgálom. Ugyancsak helytakarékosági okok miatt nem kerülhet itt sor az összes II. fejezetbeli algoritmus alkalmazására, csak a leghatékonyabb algoritmusokat alkalmazom. Ezek pedig a következők: 1. **A Konjugált Gradiens módszer az Aktív Halmazok módszerével kombinálva**; 2. **Az Aktív Halmazok módszere, mátrixok szinguláris felbontásával**. 3. **Súlyozott regularizáció a Cholesky-felbontással**. Az alábbiakban ebben a sorrendben fogom bemutatni minden vizsgált spektrum esetében a dekonvolúciót.

Az algoritmusok illusztrációjához elsőként a Co60 izotópot választottam, melynek két gamma vonala van. Az V.18. a) ábrán látható a spektrum, a b), c) és d) ábrán pedig a dekonvolúció eredménye rendre az előbbieken felsorolt 1., 2. és 3. algoritmussal.

Megjegyzem, hogy az aktív halmazok módszerét felhasználó algoritmust mindkét esetben  $\alpha = 10^{-6}$  regularizációs paraméterrel futtattam le. Az 1. esetben a keretalgoritmus 150 lépésből állt, a belső KG algoritmus pedig minden ciklusban 20 lépéses volt. A 2. algoritmus 500 lépésből



állt. A súlyozott regularizáció esetében az  $\alpha$  regularizációs paraméter értéke  $\alpha = 10^{-7}$ , a súlyozó faktor értéke pedig  $\beta = 10^3$ , a lépésszám pedig 300 volt.



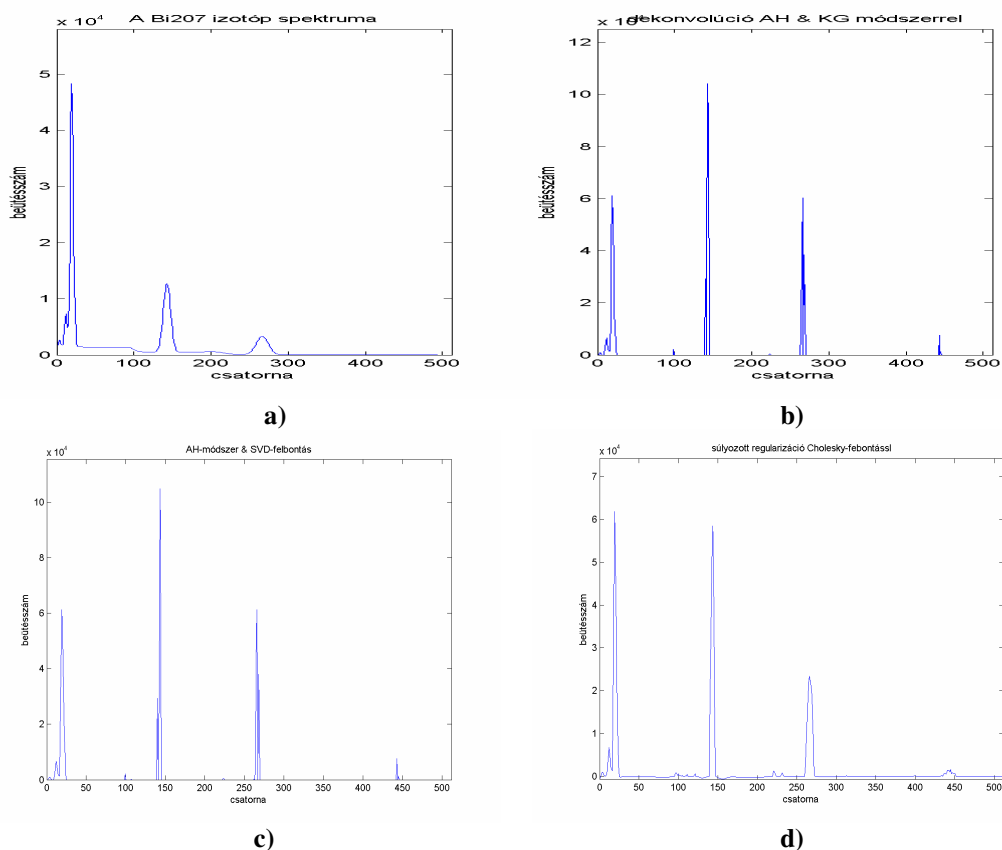
V. 18. ábra. a) A Co60 izotóp spektruma és ennek dekonvolúciója; b) Aktív halmazok + Konjugált gradiens módszerrel; c) Aktív halmazok + SVD felbontás alkalmazásával; d) Súlyozott regularizáció Cholesky-felbontással

A felsorolt adatokat a következő dekonvolúció esetében sem változtattam meg. Az egyes, dekonvolúcióval kapott megoldások adatait az V.8. táblázat tartalmazza.

Co60 izotóp	idő (s)	Pontos Energia: 1,1732 MeV		Pontos Energia: 1,3325 MeV	
		E (MeV)	w (csat)	E (MeV)	w (csat)
Aktív H. + KG	7,2	1,1709	3,58	1,3333	3,58
Aktív H. + SVD	66,1	1,1709	3,58	1,3333	3,58
Súly. Reg. + Chol.	76,8	1,1725	3,09	1,3340	2,98

V.8. táblázat. A Co60 izotóp dekonvolúciójának eredménye különböző algoritmusokkal.

A táblázatból látható, hogy mindhárom módszer ezrelék pontossággal szolgáltatja a gamma vonalak energiáját. A fél-érték szélességet azért tüntettem fel, hogy az eljárások felbontóképességéről is kapjunk információt.



**V. 19. ábra. a) A Bi207 izotóp spektruma és ennek dekonvolúciója; b) Aktív halmazok + Konjugált gradiens módszerrel; b) Aktív halmazok + SVD felbontás alkalmazásával; d) Súlyozott regularizáció Cholesky-felbontással**

A dekonvolúció illusztrációjául második példaként egy olyan izotópot választottam, amelynek három karakteres gamma vonala van. Ez a Bi207 izotóp. Az V.19. a) ábrán látható a spektrum, a b), c) és d) ábrákon pedig a dekonvolúció eredménye. Az algoritmusok sorrendje pontosan ugyanaz, mint az előző példa esetében.

Szeretnék rámutatni a tényre, hogy a dekonvolúcióval kapott megoldások mindannyian határozottan tartalmazzák a Bi207 1,7702 MeV-es gamma vonalát, ami viszont a spektrumban gyakorlatilag nem is látható! Az V.9. táblázatban összefoglaltam a megoldások adatait.

Bi207 izotóp	idő(s)	Pontos Energia: 0,5697 MeV		Pontos Energia: 1,0639 MeV		Pontos Energia: 1,7702 MeV	
		E (MeV)	w (csat)	E (MeV)	w (csat)	E (MeV)	w (csat)
Aktív H. + KG	7,3	0,5689	7,95	1,0626	7,27	1,7724	1,19
Aktív H. + SVD	64,3	0,5689	7,95	1,0611	6,84	1,7724	1,19
Súly. Reg. + Chol.	78,6	0,5710	6,13	1,0628	5,07	1,7717	5,44

**V.9. táblázat. A Bi207 izotóp dekonvolúciójának eredménye különböző algoritmusokkal.**

Ebben az esetben is azt tapasztaljuk, hogy a dekonvolúciós algoritmusok ezreléknyi pontossággal, tehát 2-3 keV energia eltéréssel szolgáltatják a gamma vonalak energiáját. Az eredeti és a dekonvolvált spektrumokban is van egy karakteres csúcs a spektrum bal szélén, ez

azonban karakterisztikus röntgen sugárzás és nem gamma vonal. Ezért nem tüntettem fel a táblázatban.

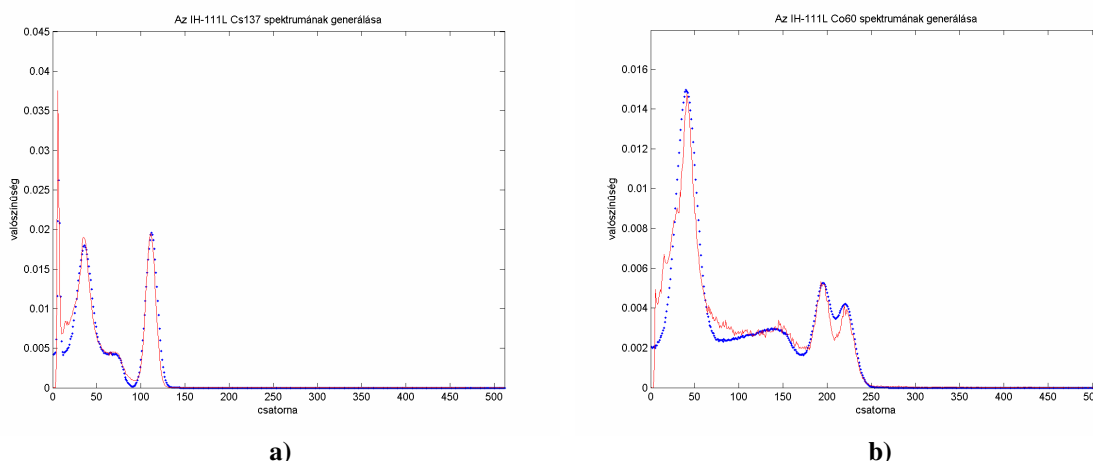
Ha mindkét táblázat adatait tekintjük, feltűnő, hogy az első két algoritmus szinte azonos eredményeket ad. Ez kissé meglepő ha arra gondolunk, hogy az első esetben a konjugált gradiens módszerrel, tehát gyakorlatilag iterációval kalkuláljuk az inverzet, a második esetben pedig egyetlen lépésben, szinguláris felbontással. Ezek elviek szempontjából teljesen független és eltérő módszerek. A közel azonos megoldás egyrészt arra utal, hogy a vezéralgoritmus az aktív halmazok módszere, másrészt viszont azzal ellenőrizni tudjuk megoldásaink valós voltát, ha mindkét algoritmus ugyanazt az eredményt szolgáltatja. Összefoglalva az eddigieket, az eredmények fényében elmondhatjuk, hogy a leírt dekonvolúciós algoritmusok hatékonyan működnek és a válaszfüggvény generálására közölt eljárás is megfelelő, a két eljárásrendszer együttesen pontos eredményeket szolgáltat. Végezetül még kiemelném, hogy a generált válaszfüggvény kondíciószáma  $\text{cond}(\mathbf{R}) = 5,5238 \cdot 10^8$ . Ez az érték azt jelzi, hogy a dekonvolúciós feladat valóban egy rosszul kondicionált lineáris rendszer.

### **V.3.2. AZ IH-111L DETEKTORRAL FELVETT SPEKTRUMOK DEKONVOLÚCIÓJA**

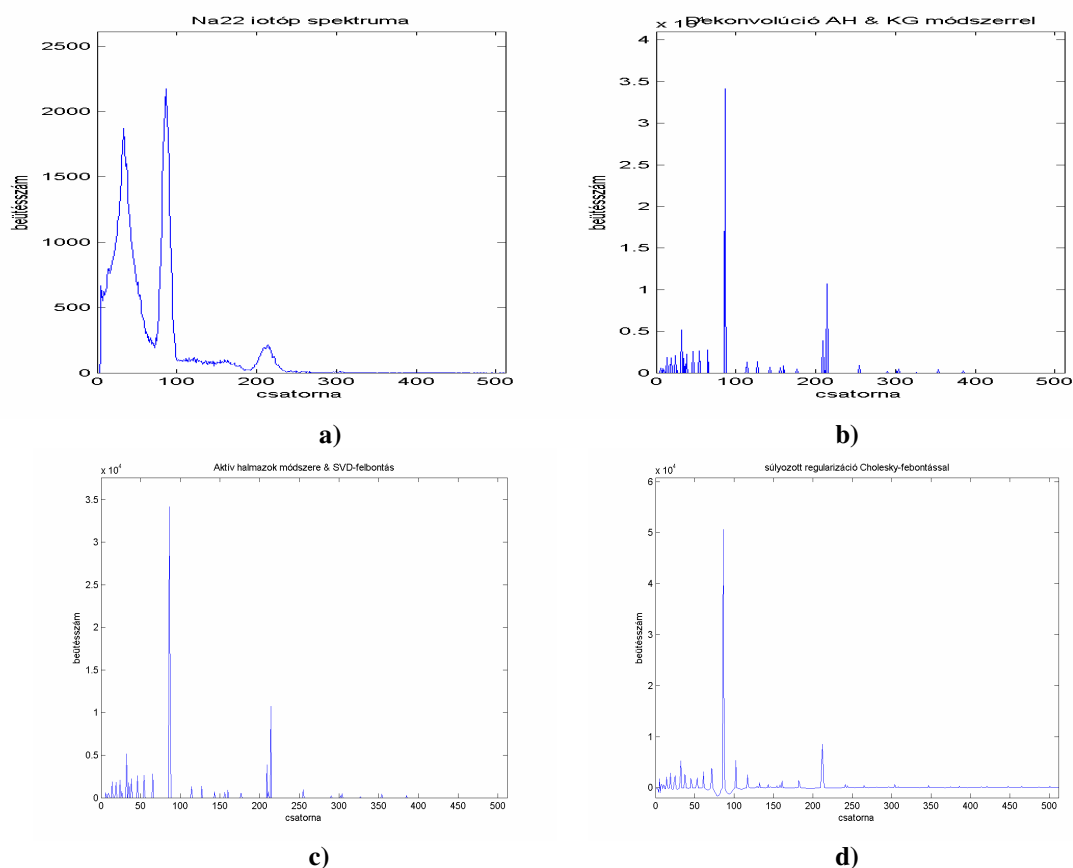
Értekezésem utolsó pontjában kísérletileg felvett gamma spektrumok dekonvolúciójával foglalkozom. Mivel elvileg mindegy, az IH-111L detektort választottam arra, hogy bemutassam a dekonvolúciós módszerek és a válaszfüggvény generálására leírt módszer alkalmazhatóságát. Azért választottam éppen ezt a detektort, mert ebben CsI kristály a szcintillátor, és amit az V.1.3. pontban kiderült, ez a detektor szolgáltatja a legszélesebb fotocúcsokat, ennek legrosszabb a felbontása. Így a tesztelésre ez a legalkalmasabb. Az alkalmazott algoritmusok pontosan ugyanazok lesznek, mint az V.3.1. pontban. Mielőtt azonban a dekonvolúciós módszerekre rátérnék, a válaszfüggvény validálását kell elvégezni. Meg kell mutatnom, hogy a generált válaszfüggvény megfelelő oszlopainak súlyozott átlagával kapott valószínűség eloszlások valóban egybeesnek a detektorral felvett spektrumok normált változatával. Ezt két izotóp esetére mutatom be. Az V.20. a) ábrán látható a validálás a Cs137 izotóp ( $E_1 = 0,032$  MeV(röntgen vonal),  $E_2 = 0,661$  MeV; a bomlási valószínűségek rendre 0,0368; 0,8520), a b) ábrán pedig a Co60 izotóp esetére ( $E_1 = 1,173$  MeV,  $E_2 = 1,332$  MeV; a bomlási valószínűségek rendre 0,9986; 0,9998).

Összehasonlítva az V.20. ábrát az V.17. ábrával, nyilvánvalóan látható, hogy sokkal kevésbé pontos az egyezés a kísérleti esetben. Ennek két nyilvánvaló oka van. A kísérleti esetben a spektrumot egyrészt módosítja a háttérsugárzás, amelyet nyilván nem kalkulálunk bele a válasz mátrixba. Másrészt pedig hangsúlyozom, hogy ebben az esetben nem volt a birtokomban kellő

számú spektrum, amelyek megfelelő mennyiségű és minőségű adatot szolgáltatnak volna ahhoz, hogy olyan pontos válaszfüggvényt generáljak, mint az elméleti esetben.



**V.20. ábra. a) A Cs137 izotóp normált spektruma (folytonos görbe) és a generált válaszfüggvények súlyozott átlaga (pontvonal); b) A Co60 izotóp normált spektruma (folytonos görbe) és a generált válaszfüggvények súlyozott átlaga (pontvonal).**



**V. 21. ábra. a) A Na22 izotóp spektruma és ennek dekonvolúciója; b) Aktív halmazok + Konjugált gradiens módszerrel; c) Aktív halmazok + SVD felbontás alkalmazásával; d) Súlyozott regularizáció Cholesky-felbontással**

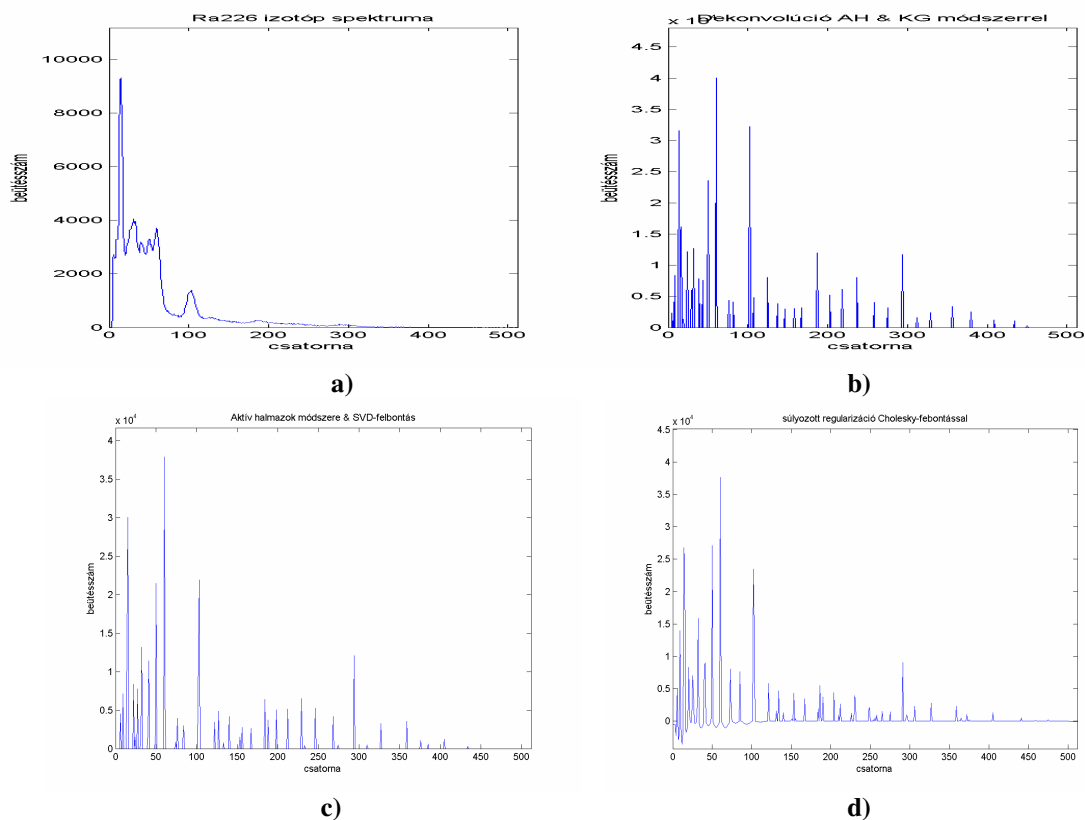
Az alábbiakban éppen azt bizonyítom be a dekonvolúcióval, hogy relatíve kevés adat is elég lehet, egy használható válaszfüggvény előállításához. Mielőtt rátérek az alkalmazásra, kiemelem, hogy a válaszfüggvény  $\text{cond}(\mathbf{R}) = 2.5293 \cdot 10^{20}$ , vagyis 12 nagyságrenddel nagyobb a kondíciós szám mint az elméleti esetben. Nyilván ez a tulajdonság is rontja a megoldások

minőségét. Elsőként a Na22 izotóp spektrumának dekonvolúcióját mutatom be. A mért spektrumot és a három említett módszerrel elvégzett dekonvolúció eredményét az V.21. ábrán mutatom be. Az egyes megoldások tulajdonságait az V.10. táblázat tartalmazza.

Na22 izotóp		Pontos Energia:0,5110 MeV		Pontos Energia: 1,2745 MeV	
Algoritmus	idő (s)	E (MeV)	w (csat)	E (MeV)	w (csat)
Aktív H. + KG	8,7	0,5110	1,2	1,2685	5,9
Aktív H. + SVD	53,2	0,5110	1,2	1,2685	5,9
Súly. Reg. + Chol.	128	0,5109	1,2	1,2804	1,3

V.10. táblázat. A Na22 izotóp dekonvolúciójának eredménye különböző algoritmusokkal.

Tekintettel a nagyobb kondíciósámra, az algoritmusok paramétereit kissé „erősíteni” kellett. Az aktív halmazok módszerét felhasználó algoritmust mindkét esetben  $\alpha = 10^{-8}$  regularizációs paraméterrel futtattam le. Az 1. esetben a keretalgorithmus 300 lépésből állt, a belső KG algoritmus pedig minden ciklusban 20 lépéses volt. A 2. algoritmus 500 lépésből állt. A súlyozott regularizáció esetében az  $\alpha$  regularizációs paraméter értéke  $\alpha = 10^{-9}$ , a súlyozó faktor értéke pedig  $\beta = 10^3$ , a lépésszám pedig 1000 volt. Mint látható a sokkal rosszabb kondicionáltság ellenére mindegyik módszer szolgáltatja a gamma vonalak energiáját, az eltérés nem 2-3 keV, mint az elméleti esetben volt, hanem 5-6 keV, ami ugyancsak nem mondható rossz eredménynek.



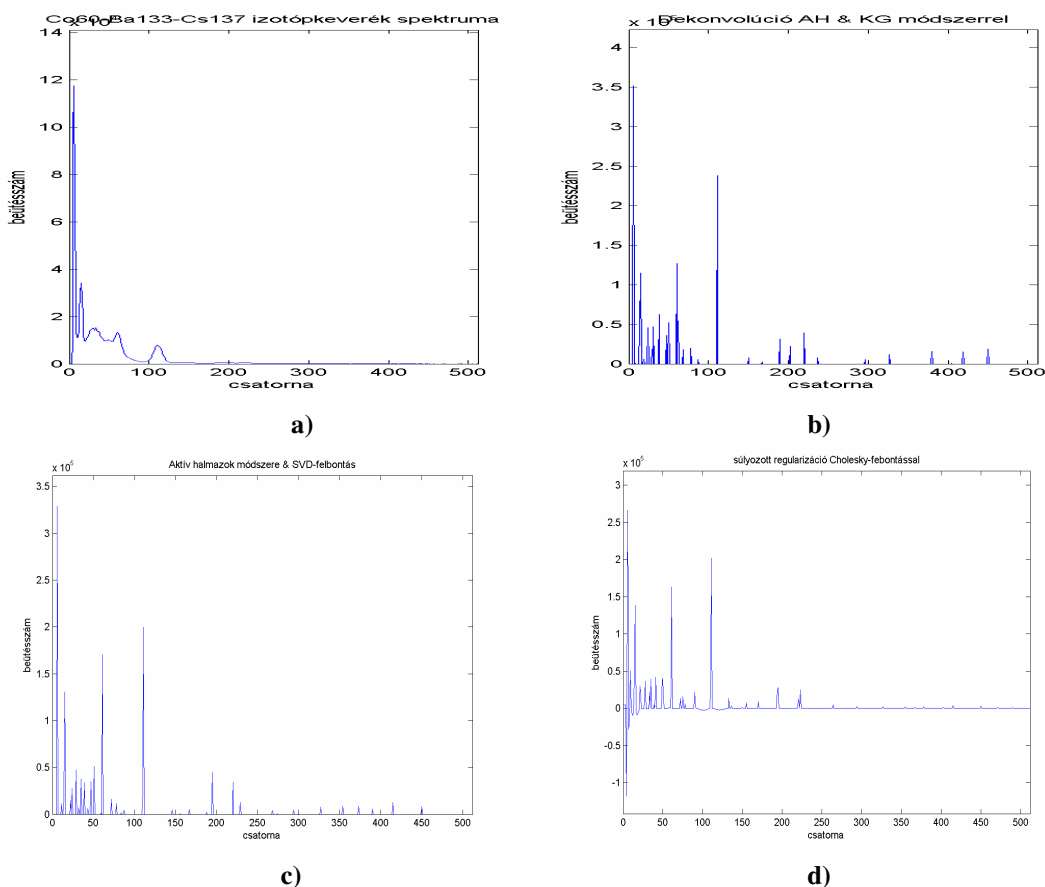
V. 22. ábra. a) A Ra226 izotóp spektruma és ennek dekonvolúciója; b) Aktív halmazok + Konjugált gradiens módszerrel; b) Aktív halmazok + SVD felbontás alkalmazásával; d) Súlyozott regularizáció Cholesky-felbontással

Ra226	Pontos energia	0,2952	0,3519	0,6093	1,1202	1,7645
	bomlási gyakoriság	18,12%	35,1%	44,6%	14,7%	15,1%
Algoritmus	idő(s)	E (MeV)	E (MeV)	E (MeV)	E (MeV)	E (MeV)
Aktív H. + KG	21,3	0,2921	0,3543	0,6067	1,1238	1,7800
Aktív H. + SVD	54,8	0,2921	0,3525	0,6127	1,1055	1,7800
Súly. Reg. + Chol.	128,2	0,2921	0,3536	0,6097	1,1360	1,7615

V.11. táblázat: A Ra226 izotóp dekonvolúciójának eredménye különböző algoritmusokkal.

A spektrum meglehetősen összetett, ennek ellenére 1% nagyságrendű hibával mindegyik csúcs, így maga az izotóp is azonosítható minden egyes algoritmus esetében. A dekonvolvált spektrumok részletes vizsgálatával a Ra226 és leányelemei gamma spektrumában – a szakirodalom szerint [4] – található 14 gamma vonal közül 11 kimutatható, csak az 1% nagyságrendű bomlási valószínűséggel rendelkező csúcsok vesznek el a háttérben.

Utolsó példaként egy keverékspektrumot választottam a teszteléshez. Elvégeztem a Co60-Ba133-Cs137 izotóphármas együttes spektrumának dekonvolúcióját. Az V.23. a) ábrán látható a már megszokott módon az izotópkeverék spektruma, a b), c) és d) ábrán pedig a dekonvolúció eredménye.



V. 23. ábra. a) A Co60-Ba133-Cs137 izotópok keverékének spektruma és ennek dekonvolúciója: b) Aktív halmazok + Konjugált gradiens módszerrel; c) Aktív halmazok + SVD felbontás alkalmazásával; d) Súlyozott regularizáció Cholesky-felbontással

Elsőként a grafikonokat vizuálisan értékelve, mindegyik algoritmus alkalmazása esetén világosan látszik ugyanaz a hat erős vonal. Balról jobbra haladva: a bal szélső a Cs137 röntgenvonala, a következő kettő a Ba133 két gamma vonala, azután a Cs137 gamma vonala, majd a spektrumok közepe táján látható még két határozott vonal a Co60 két gamma vonala. A dekonvolúcióval kapott megoldások adatait (a röntgen vonal kivételével) az V.12. táblázatban foglaltam össze.

	Izotópok	Co60		Ba133		Cs137
	Pontos energia	1,1732	1,3325	0,0809	0,3560	0,6616
Algoritmus	idő(s)	E (MeV)	E (MeV)	E (MeV)	E (MeV)	E (MeV)
Aktív H. + KG	11,2	1,1849	1,3439	0,0811	0,3585	0,6613
Aktív H. + SVD	59,6	1,1727	1,3256	0,0811	0,3585	0,6612
Súly. Reg. + Chol.	128,4	1,1727	1,3439	0,0811	0,3585	0,6612

**V.12. táblázat: A Co60-Ba133-Cs137 izotópok együttes spektrumának dekonvolúciója különböző algoritmusokkal.**

A táblázat adatainak figyelembe vételével levonhatjuk a következtetést, hogy mindhárom algoritmus eredményesen alkalmazható gamma spektrum dekonvolúciójára és ezáltal izotóp azonosításra, ha a spektrum több izotóp keverékének együttes spektruma.

Ha az egyes algoritmusokat számszerűen, a gamma-energiák azonosítása szempontjából vetjük össze, nem fedezhetünk fel közöttük lényeges különbséget, bármelyik algoritmussal ugyanolyan hatékonysággal végezhetünk izotópozonosítást. Apró különbségek természetesen vannak. A Na22 spektrumában például mindkét aktív halmazokat felhasználó algoritmus több közeli Dirac-deltát ad ott, ahol a súlyozott regularizáció egyetlen határozott csúcsot ad, a keverék spektrum esetén is tisztábbnak, fluktuációktól mentesebbnek adódik a súlyozott regularizáció által adott megoldás, ugyanakkor a Ra226 spektrumában sokkal karakteresebben adódnak az erős gamma-vonalak a konjugált gradiens módszerrel, a kisebb valószínűségű gamma vonalakat pedig a szinguláris felbontás adja a háttérből legkiemelkedőbben. Ezzel arra a bevezetőben már megfogalmazott gondolatra szerettem volna újra utalni, hogy izotópozonosítás során egyszerre több, eltérő elvi alapokon nyugvó dekonvolúciós módszert célszerű alkalmazni, és az összes dekonvolvált spektrum együttesének kiértékelése után nyilatkozhatunk az izotópok minőségét illetően.

#### **V.4. ÖSSZEGZETT KÖVETKEZTETÉSEK**

A fejezetben egyrészt leírtam az eljárást, amely segítségével, kellő számú és minőségű szcintillációs gamma spektrum birtokában, egy szcintillációs detektor kalibrálható. Leírtam a kalibráláshoz szükséges algoritmusokat, a kalibrációs függvények analitikus alakját, az illesztési

algoritmust és ezek implementációját is megadtam elektronikusan. Ezek birtokában elvégeztem a kalibrációt egyrészt egy elméleti esetre vonatkozólag, másrészt kalibráltam azt a három detektort amellyel a méréseimet is végeztem. Másrészt megadtam azt az eljárást, amellyel az elvégzett kalibrációk birtokában generálni lehet egy szcintillációs detektor válaszfüggvényét.

Pontosítottam mind a foto-csúcsnak mind a Compton-tartománynak a szakirodalomban megtalálható analitikus leírását. Ennek a pontosabb leírásnak a felhasználásával, Monte-Carlo algoritmusok keretében előállítottam egy elméleti esetre a válaszfüggvényt, továbbá előállítottam a méréseimhez használt mindhárom detektor válaszfüggvényét is. Bebizonyítottam az elméleti esetben is valamint a méréssel kapott spektrumok esetében is, hogy a leírt módszer valóban alkalmas eljárás válaszfüggvény előállítására.



## 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 multipllett foto-csúcsokat 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  $E < 1 \text{ MeV}$  és  $E > 1 \text{ MeV}$  energiatartományban.

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

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

1. A kalibrációs eljárás;
2. Generálható a detektor válaszfüggvénye;
3. Dekonvolúciós algoritlussal 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 portfólió 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.

# SAJÁT PUBLIKÁCIÓK

## I. Az értekezés témájához szorosan kapcsolódó publikációk:

1. Hanka László – Zalay Miklós: Komplex függvénytan. Műszaki Könyvkiadó. Budapest. 2003. ISBN 963 16 2816 7
2. Hanka László – Dr. Vincze Árpád – Dr. Solymosi József: A nukleáris terrorizmus, mint potenciális fenyegetettség napjainkban. Cikk. Hadmérnök. 2007/4. 4-24. o.
3. Hanka László – Dr. Vincze Árpád: A radiológiai terrorizmus egyik lehetséges eszköze: a „piszkos bomba”. Cikk. Bolyai Szemle. 2007/III. 51-74. o.
4. Hanka László – Dr. Vincze Árpád: A Gamma-spektrumok kiértékelésének matematikai módszerei I. A klasszikus Van-Cittert féle és a gold-féle iteráció. Cikk. Bolyai Szemle. 2008/I. 127-144. o.
5. Hanka László – Dr. Vincze Árpád: A Gamma-spektrumok kiértékelésének matematikai módszerei II. Regularizációs módszerek. Cikk. Bolyai Szemle. 2008/III. 33-54. o.
6. Hanka László – Dr. Vincze Árpád: A Gamma-spektrumok kiértékelésének matematikai módszerei III. A maximum-entrópia módszer. Cikk. Bolyai Szemle. 2009/I. 27-46. o.
7. Hanka László – Dr. Vincze Árpád: A Gamma-spektrumok kiértékelésének matematikai módszerei IV. A Maximum-likelihood becslés. Cikk. Bolyai Szemle. 2009/II. 7-30. o.
8. Hanka László: An efficient quadratic programming optimization method for deconvolution of gamma-ray spectra. Cikk. AARMS. 2010. Year 2010, Volume 9 Issue 1. pp. 47– 66.

## II. Az értekezés témájához nem vagy csak érintőlegesen kapcsolódó publikációk:

1. Hanka László: Mechanika és optika. Főiskolai jegyzet Bolyai János Katonai Műszaki Főiskola. Budapest, 1998.
2. Hanka László: Atomfizika és magfizika. Főiskolai jegyzet. Bolyai János Katonai Műszaki Főiskola. Budapest, 1999.
3. Hanka László: Útmutató (Atomfizika, magfizika, fénytan példatár). Főiskolai jegyzet. Bolyai János Katonai Műszaki Főiskola. Budapest, 1999.
4. Hanka László – Dr. Horváth István: Fénytan. Egyetemi jegyzet. ZMNE BJKMK, Budapest, 2006.
5. Hanka László: Alkalmazott matematika. Elektronikus egyetemi jegyzet. ZMNE BJKMK Budapest, 2006.
6. Hanka László: Alkalmazott matematika példatár. Elektronikus egyetemi jegyzet. ZMNE BJKMK Budapest, 2006.
7. Hanka László: Valószínűségszámítás. Elektronikus egyetemi jegyzet. ZMNE BJKMK, Budapest, 2007.
8. Hanka László – Dr. Halász László – Dr. Vincze Árpád: A nukleáris fegyverek előregedésének vizsgálata, és új fejlesztési lehetősége az Amerikai Egyesült Államokban. Cikk. Hadmérnök. 2007/III. 9-21. o.
9. Halász László – Hanka László – Vincze Árpád: A nukleáris erőművek negyedik generációjának és egy korszerűbb reprocesszálni eljárás jövőbeli alkalmazásának lehetősége a nukleáris hulladékok növekvő mennyiségének és elhelyezési problémájának tükrében. Cikk. Hadmérnök. 2008/3. 25-48. o.

## FELHASZNÁLT IRODALOM

1. Nagy Lajos György, Nagyné László Krisztina: Radiokémia és izotóptechnika. Műegyetemi Kiadó, Budapest, 1997. IV., V. fejezet. ISBN 963 420 532 1
2. Bódizs Dénes: Atommagsugárzások mérés technikái. Typotex, Budapest, 2006 ISBN 978 9 639664 31 9
3. Keszthelyi, L.: Szcintillációs számlálók. Műszaki Kiadó, Budapest, 1964.
4. K. Debertin, R.G. Helmer: Gamma and X-ray spectrometry with semiconductor detectors. North-Holland, Amsterdam, 1988.
5. Glenn F. Knoll: Radiation detection and measurement. John Wiley and Sons, London, 1979.
6. Crouthamel, C. E.: Applied Gamma-ray Spectrometry. Pergamon Pt., Oxford, 1960
7. Dekonnick, G.: Introduction to radioanalytical Physics. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1978
8. Földiák, G.: Industrial Application of Radioisotopes. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1986.
9. Markus Firsching, Patrick Takoukam Talla, Thilo Michel, Gisela Anton: Material resolving X-ray imaging using spectrum reconstruction with Medipix2. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A Vol. 591 (2008) pp. 19–23
10. Rózsa Pál: Lineáris algebra és alkalmazásai. Tankönyvkiadó, Budapest, 1976 ISBN 978 963 2790 28 2
11. Freud, R.: Lineáris algebra. ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 2007. ISBN 963 463 4710
12. Fried, E.: Klasszikus és lineáris algebra. Tankönyvkiadó, Budapest, 1977.
13. Krekó Béla: Lineáris algebra. Közgazdasági és Jogi Könyvkiadó, Budapest, 1976. ISBN 963 220 289 9

14. P.R.Halmos: Finite-dimensional vector spaces. Van Nostrand, Princeton, NJ, 1958.
15. Bellmann, R.: Introduction to Matrix Analysis. McGraw-Hill Book Company, New York, 1960.
16. Householder, A. S.: The Theory of Matrices in Numerical Analysis. Blaisdell, New York, 1964.
17. Lancaster, P., Tismenetsky, M.: Theory of Matrices. Academic Press, New York, 1985.
18. Stoyan Gisbert, Takó Galina: Numerikus módszerek, Typotex, Budapest, 2006. ISBN 978 963 9326200
19. Pringle, R. M., Rayner, A. A.: Generalised Inverse Matrices with Applications to Statistics. Griffen, London, 1971.
20. Rao, C. R., Mitra. S. K.: Generalised Inverse Matrices with Applications. Wiley and Sons, New York, 1971.
21. Bermann, A., Plemmons, R. J.: Nonnegative Matrices in the Mathematical Sciences. Academic Press, New York, 1979.
22. Bunch, J. R., Kaufmann, L.- Parlett, B. N.: Handbook Series Linear Algebra: Decomposition of a symmetric Matrix. Numerical Mathematics, Vol. 27 (1976) pp. 95-109.
23. Forsythe, G. E., Malcolm, M. A., Moler, C. B.: Computer Methods for Mathematical Computations. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1977.
24. George, A., Liu, J. W. H.: Computer Solutions of Large Sparse Positive Definite Systems. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1981.
25. Householder, A. S.: The Numerical Treatment of a Single Nonlinear Equation. McGraw-Hill Book Company, New York, 1970.
26. Hageman, L. A., Young. D. M.: Applied Iterative Methods. Academic Press, New York, 1981.
27. Lawson, C. L., Hanson, R. J.: Solving Least Squares Problems. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1974.
28. Rice, J. R.: Matrix Computation and Mathematical Software. McGraw-Hill Book Company, New York, 1981.
29. S. Morigia, L. Reichelb, F. Sgallaria, F. Zamaa: An iterative method for linear discrete ill-posed problems with box constraints. Journal of Computational and Applied Mathematics Vol. 198 (2007) pp. 505 – 520.
30. M. Morhac: Deconvolution methods and their applications in the analysis of gamma-ray spectra. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A 559 (2006) pp. 119-123.
31. L.J. Meng, D. Ramsden: An Inter-comparison of Three Spectral-Deconvolution Algorithms for Gamma-ray Spectroscopy; Department of Physics and Astronomy, University of Southampton, IEEE Transactions on Nuclear Science, Vol. 47. No. 4. August 2000.
32. M. Morhac, V. Matousek: Complete positive deconvolution of spectrometric data. Digital Signal Processing Vol. 19 (2009) pp. 372–392.
33. Miroslav Morhac: An algorithm for determination of peak regions and baseline elimination in spectroscopic data. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 600 (2009) pp. 478–487
34. M. Morhac: Deconvolution methods and their applications in the analysis of gamma-ray spectra. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 559 (2006) pp. 119–123
35. L. Bouchet: A Comparative study of deconvolution methods of gamma-ray spectra. Astronomy and Astrophysics Supplement Series. Ser.113 (1995) pp. 167-183.
36. Hanka László, Dr. Vincze Árpád: Gamma-spektrumok kiértékelésének matematikai módszerei II. Regularizációs módszerek. Bolyai szemle, 2008/III. 33-54. o.
37. Stoyan Gisbert: MATLAB. Typotex, Budapest, 2005. ISBN 978 963 9664 82 1
38. P.H. Van Cittert: Zum Einfluss der Spaltbreite auf die Intensitätsverteilung in Spektrallinien. Zeitschrift für Physik, Vol. 69 (1931) pp. 298-315.
39. Hanka L., Vincze Á.: Gamma-spektrumok kiértékelésének matematikai módszerei I. A „klasszikus” van Cittert-féle és a Gold-féle iteráció. Bolyai Szemle, 2008/I. 127-144. o.
40. Kovács Margit: A nemlineáris programozás elmélete. Typotex, Budapest, 2004. ISBN 978 963 754685 3
41. Gill, P. E., Murray, W., Wright. M. H.: Practical Optimization. Academic Press, New York, 1981.
42. Ortega, J. M., Rheinboldt, W. C.: Iterative Solutions of Nonlinear Equations in Several Variables. Academic Press, New York, 1970.
43. Powell, M. J. D.: Approximation Theory and Methods. Cambridge University Press, Cambridge, 1981.
44. V.G.Karmanov: Mathematical programming. Mir publishers, Moscow, 1989
45. J.M. Bardsley, C.R.Vogel: A nonnegatively constrained convex programming method for image reconstruction. SIAM. J. Sci. Comput. Vol. 25 (2003) pp. 1326-1343.
46. Hanka László: An efficient quadratic programming optimization method for deconvolution of gamma-ray spectra. Cikk. AARMS. 2010. Year 2010, Volume 9 Issue 1. pp. 47– 66.
47. Axelsson, O.: Conjugate Gradient type Methods for unsymmetric and inconsistent systems of linear equations. Linear Algebra and Applications, Vol. 29 (1980) pp. 1-16.
48. Hestens, M., Stiefel, E.: Methods of conjugate gradients for solving linear systems. J. Res. Nat. Bur. Standards, Vol. 49 (1952) pp. 409-436.
49. Magnus R. Hestenes, Eduard Stiefel. Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems. Journal of Research of the National Bureau of Standards Vol. 49, No. 6, December 1952

50. C. C. Broyden: A New Taxonomy of Conjugate Gradient Methods. *Computers Math. Applic.* Vol. 31, No. 4/5, (1996) pp. 7-17.
51. M. H. B. M. Shariff: A Constrained Conjugate Gradient Method and the Solution of Linear Equations. *Computers Math. Applic.* Vol. 30, No. 11, (1995) pp. 25-37.
52. Daniela Calvetti: Preconditioned iterative methods for linear discrete ill-posed problems from a Bayesian inversion perspective. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 198 (2007) pp. 378 – 395
53. Ekaterina Kostina Olga Kostyukova: A Primal-Dual Active-Set Method for Convex Quadratic Programming *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, Vol. 42 (2001) pp. 1012 - 1026.
54. G.Landi, F.Zama: The active-set method for nonnegative regularization of linear ill-posed problem. *Applied mathematics and computation*. Vol. 175 (2006) pp. 715-729.
55. Jánosy Lajos: Mérési eredmények kiértékelésének elmélete és gyakorlata. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1968.
56. Denkinger Géza: Valószínűségszámítás. Tankönyvkiadó, Budapest, 2004. ISBN 963 18 8287 X
57. Rényi Alfréd: Valószínűségszámítás. Tankönyvkiadó, Budapest, 1978.
58. Prékopa András: Valószínűségelmélet műszaki alkalmazásokkal. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1961.
59. Feller, W.: An Introduction to Probability Theory and its applications. Wiley and Sons, New York, 1950.
60. Todd K. Moon: The Expectation Maximization Algorithm: *IEEE Signal Processing Magazine*, 1996 November.
61. V.A.Muravsky, S.A.Tolstov-A.L.Kholmetskii: Comparison of the least squares and the maximum likelihood estimators for gamma-spectrometry. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* Vol. 145 (1998) pp. 573-577
62. T.Hauschild, M.Jentschel: Comparison of maximum likelihood estimation and chi-square statistics applied to counting experiments. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A* 457 (2001) pp. 384-401.
63. Z. Liua, J. Almhanaa, V. Choulakiana, R. McGormanb: Online EM algorithm for mixture with application to internet traffic modeling. *Computational Statistics & Data Analysis* Vol.38 (1983) pp. 128-136.
64. Lucy, L. B.: An iterative technique for the rectification of observed distributions. *The Astronomical Journal*. Vol. 79. No.6. (1974) pp. 745-754.
65. George Kontaxakis: Maximum Likelihood Algorithms for Image Reconstruction in Positron Emission Tomography. *MEDITERRA Publishers, Athens*, (1998) pp. 73-106
66. Hanka László, Vincze Árpád: Gamma-spektrumok kiértékelésének matematikai módszerei VI. A Maximum Likelihood Módszer És A Várható Érték Maximalizálásának Elve. *Bolyai szemle*, 2009/III. 7-30. o.
67. E.T Jaynes: *Information Theory and Statistical Mechanics*. *Physical Review*, Vol. 106 (1957) pp. 620-630.
68. Thomas M. Cover, Joy A. Thomas: *Elements of information theory*.Wiley & sons, London, 2005
69. Hanka László, Vincze Árpád: Gamma-spektrumok kiértékelésének matematikai módszerei III. A maximum entrópia módszer. *Bolyai szemle*, 2009/I. 27-46. o.
70. Jose M. Los Arcos: Gamma-ray spectra deconvolution by maximum-entropy methods. *Nuclear Instruments and methods in Physics Research A* (1996) pp. 634-636.
71. A. Plastino: Tsallis Entropy and Jaynes' Information Theory Formalism: *Brazilian Journal of Physics*, Vol. 29, no. 1, March, 1999
72. Edwin T. Jaynes: Prior Probabilities. *IEEE Transactions On Systems Science and Cybernetics*, vol. sec-4, no. 3, (1968), pp. 227-241
73. V.M. Prozesky, J. Padayachee, R. Fischer b, W. von der Linden b, V. Dose b, R.A. Weller: Bayesian techniques and the principle of maximum entropy in ionbeam analysis applications. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 136-138 ( 1998) pp. 46-51
74. Yoram Baram: Bayesian classification by iterated weighting. *Neurocomputing*, Vol. 25 (1999) pp. 73-79
75. Bronstejn, Szemengyajev: *Matematikai zsebkönyv*. Typotex, Budapest, 2008. ISBN 978 963 2790 79 4
76. Járai Antal: *Modern alkalmazott analízis*. Typotex, Budapest, 2009. ISBN 978 963 9664 47 0
77. Rudin, W.: *Real and Complex Analysis*. McGraw-Hill Book Company, New York, 1963.
78. S.A. Gerasimov: A direct method for separating peak multiplet in X-ray and gamma-ray spectra. *Applied radiation and isotopes*. Vol. 46 (1995) pp. 181-184.
79. Brian Davies: *Integráltranszformációk és alkalmazásaik*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1983. ISBN 1044637
80. Liu, Bede: *Digital filters and the fast Fourier transform*. Stroudsburg, Dowden, Hutchinson & Ross, 1975.
81. C. S. Burrus, T. W. Parks: *DFT/FFT convolution algorithms*. Wiley & Sons, New York, 1985
82. E.M.Stein-G.Weiss: *Intoduction to Fourier analysis on Euclidean spaces*. Princeton University Press, Princeton, New Yersey, 1971.
83. Hanka László, Zalay Miklós: *Komplex függvénytan*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 2003. ISBN 963 16 2816 7

84. Alan W. Oppenheim, Ronald W. Schaffer, Englewood Cliffs, N. J. : Discrete-time signal processing. Prentice-Hall Intern., 1989
85. Székely Vladimír: Képkorrektúra, hanganalízis, térszámítás PC-n, gyors Fourier transzformációs módszerek. – Budapest, ComputerBooks, 1997.
86. Y.B.Yuan, T.V.Vorburger, J.F.Song-T.B.Renegar: A simplified realization for the Gaussian filter in surface metrology. X. International Colloquium on Surfaces. Jan.31-Feb.02. (2000) pp. 133-138.
87. Michael Krystek: A fast Gauss filtering algorithm for roughness measurements. Precision Engineering. Vol. 19 (1996) pp. 198-200.
88. O.Ju. Smirnov: An approximation of the ideal scintillation detector line shape with a generalized gamma distribution. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 595 (2008) pp. 410–418
89. Hashem Miri Hakimabad, Hamed Panjeh, Alireza Vejdani-Noghreian: Evaluation the nonlinear response function of a 3\_3 in NaI scintillation detector for PGNA applications. Applied Radiation and Isotopes 65 (2007) pp. 918–926
90. Arvind D. Sabharwal, Manpreet Singh, Bhajan Singh, B.S. Sandhu: Response function of NaI(Tl) detectors and multiple backscattering of gamma rays in aluminium Applied Radiation and Isotopes Vol. 66 (2008) pp. 1467– 1473
91. M.J. Berger, S.M. Seltzer: Response function for sodium iodine scintillation detectors; Nuclear Instruments And Methods; Vol.104 (1972) pp. 317-332.
92. Arvind D. Sabharwal, Manpreet Singh-Bhajan Singh, B.S.Sandhu: Response function of NaI(Tl) detectors and multiple backscattering of gamma rays in aluminium. Applied radiation and isotopes. Vol. 66 (2008) pp. 1467-1473.
93. Ahmet Cengiz: An approximation for response function to gamma-rays of NaI(Tl) detectors up to 1,5 MeV. Applied Radiation and Isotopes. Vol. 66 (2008) pp. 1371-1376.
94. A.H.D. Rasolonjatovo, T.Nakamura-N.Nakao, T.Nunomiya: Response function to photons and to muons of a 12.7cm diam. By 12.7cm long NaI(Tl) detector. Nucl. Instr. & Meth. In Phys. Res. Vol. 498 (2003) pp. 328-333.
95. M Jandel, M. Morhac, J. Kliman, L. Krupa, V. Matousek, J.H. Hamilton, A.V. Ramaya: Decomposition of continuum  $\gamma$ -ray spectra using synthesized response matrix. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research, A 516 (2004) pp. 172-183.
96. Srikanta Sinha: Simulation of X-ray and gamma ray detector response and spectral deconvolution. Advances in Space Research Vol. 38 (2006) pp. 3005–3007
97. A.H.D. Rasolonjatovo, T. Nakamura, N. Nakaob, T. Nunomiya: Response functions to photons and to muons of a 12.7 cm diam. by 12.7 cm long NaI(Tl) detector. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 498 (2003) pp. 328–333
98. Arvind D. Sabharwal, Manpreet Singh, Bhajan Singh, B.S. Sandhu: Response function of NaI(Tl) detectors and multiple backscattering of gamma rays in aluminium. Applied Radiation and Isotopes Vol. 66 (2008) pp. 1467– 1473
99. D.S. Vlachos, C. Tsabaris: Response function calculation of an underwater gamma ray NaI(Tl) spectrometer. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 539 (2005) pp. 414–420
100. I.M.Szobol: A Monte Carlo-módszerek alapjai. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1981.
101. Hu-Xia Shi, Bo-Xian Chen, Ti-Zhu Li, Di Yun: Precise Monte Carlo simulation of gamma ray response function for an NaI(Tl) detector: Applied radiation and isotopes. Vol. 57 (2002) pp. 517-524.
102. K.D.Tocher: The Art of Simulation. Van Nostrand. Princeton, New Jersey, 1963.
103. D.V.Gopinath, K.Gopala: Analytical computation of the Compton continuum in gamma-ray spectrometry. Radiation Physics and Chemistry. Vol. 56 (1999) pp. 525-534.
104. Avneet Sood a, Robin P. Gardner: A new Monte Carlo assisted approach to detector response functions Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 213 (2004) pp. 100–104
105. S.A. Ghanem: Monte Carlo calculations of the response features for NaI detectors. Applied Radiation and Isotopes Vol. 53 (2000) 877-880
106. Robin P. Gardner, Avneet Sood: A Monte Carlo simulation approach for generating NaI detector response functions (DRFs) that accounts for non-linearity and variable flat continua. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 213 (2004) pp. 87–99
107. Jehouani, A. Merzouki, F. Boutadghart, J. Ghassoun: Spatial distribution of reflected gamma rays by Monte Carlo simulation. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 263 (2007) pp. 112–115
108. Fayez H.H. Al, Ghorabie: Development of a computer code using the EGS4 Monte Carlo simulation system to evaluate the response of a NaI(Tl) detector to photons with energies below 300 keV. Applied Radiation and Isotopes 64 (2006) pp. 85–92.
109. Hu-Xia Shi, Bo, Xian Chen, Ti, Zhu Li, Di Yun: Precise Monte Carlo simulation of gamma-ray response functions for an NaI(Tl) detector. Applied Radiation and Isotopes 57 (2002) pp. 517–524

## MELLÉKLET

### ÁBRÁK, KÉPEK, TÁBLÁZATOK, SPEKTRUMOK

1. melléklet: A GAMMA ZRt. IH-111L típusú szcintillációs detektora. A szcintillátor CsI kristály, az analízátor csatornáinak száma 512.

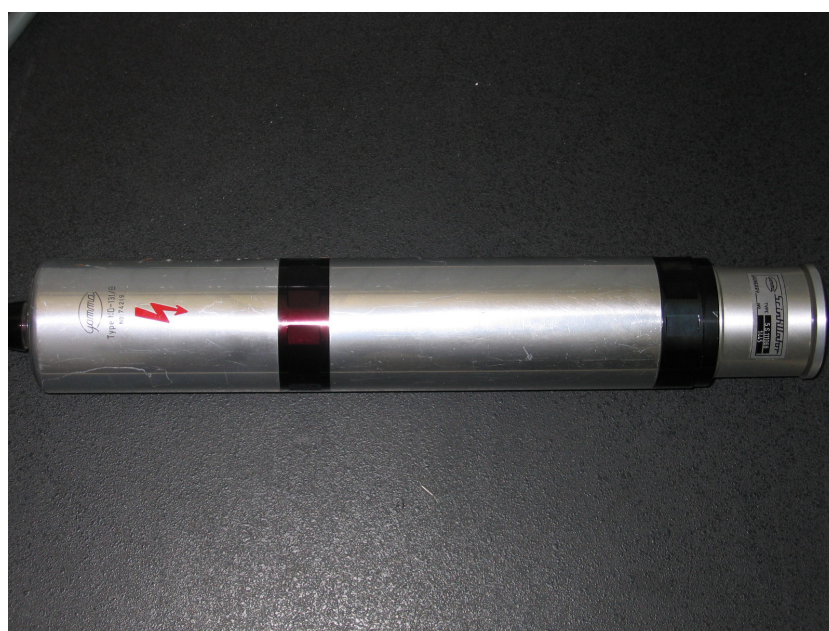


2. melléklet: A Berkeley-detektor. 7,62×7,62cm méretű NaI(Tl) szcintillációs kristállyal. Az analízátor csatornáinak száma 256.

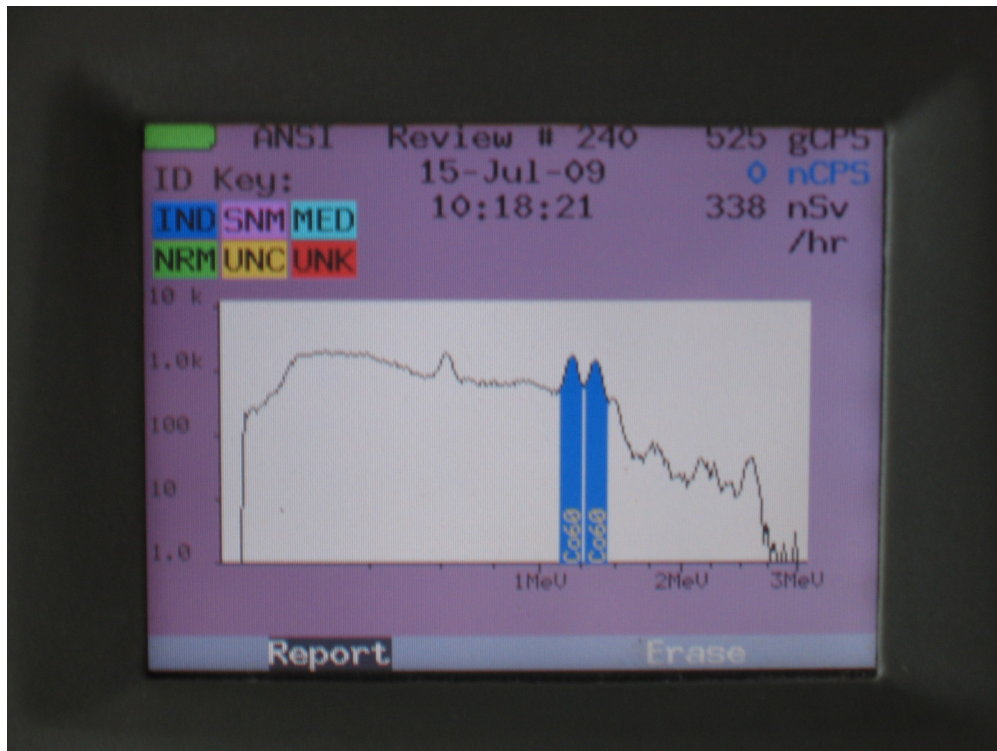




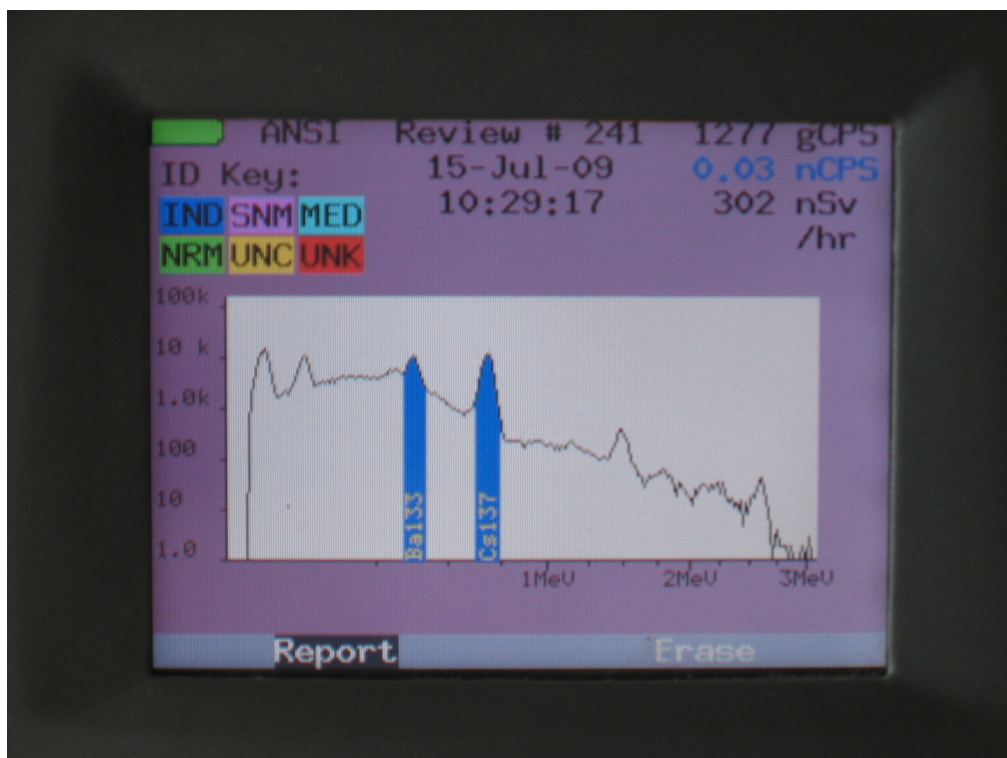
**3. melléklet: A GAMMA ZRt. ND-131-B szcintillációs detektora. 7,62×7,62cm méretű NaI(Tl) szcintillációs kristállyal. Az analizátor csatornáinak száma 1024.**



4. melléklet: A hagyományos csúskeresési eljárás korlátai: A Berkeley-detektorral készült, kiértékelte spektrumok: a) a Co60 izotóp jellegzetes gamma vonalait tartalmazó spektrum, b) a Ba133 és a Cs137 izotóp egy-egy jellegzetes gamma vonalát tartalmazó spektrum. Mindkét spektrumban láthatók jól kirajzolódó ámde nem annyira szabályos Gauss-görbék. Ezeket azonban a kiértékelő szoftver nem azonosítja.



4. a)



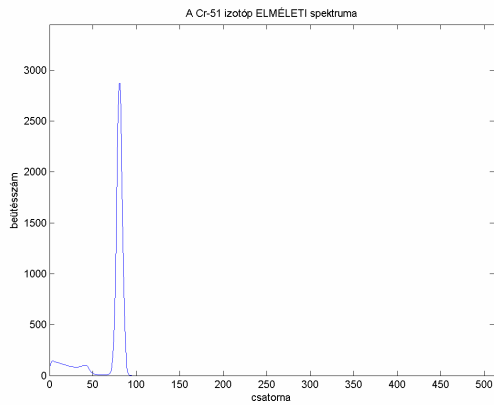
4. b)

**5. melléklet: Nuklidok (és a nuklidokkal szekuláris egyensúlyban lévő izotópok) legnagyobb valószínűségű gamma vonalai**

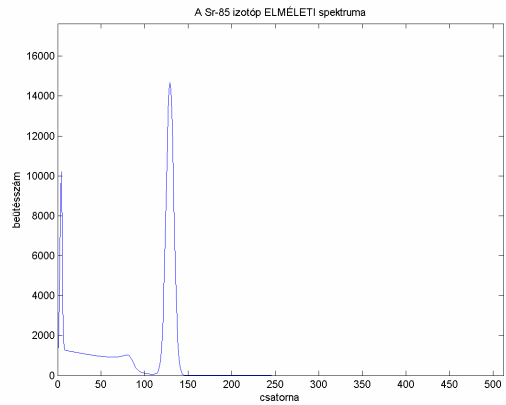
ssz	nuklid	referencia		felezési ido		$\lambda$	meresi	maradvany	csúcsok (MeV)
		aktivitas (kBq)	idopont	idopont	datum		Aktivitas (kBq)		
<b>A Havarria-Laboratórium izotópjai</b>									
1	Ra226	5,032	2003.09.01	5,84E+05	d	1,19E-06	2009.07.06	5,019274	0,295(18,2%); 0,351(35,1%); 0,609(44,6%); 1,120(14,7%); 1,764(15,1%)
2	Eu152	2058	2003.09.01	4933	d	1,41E-04	2009.07.06	1524,613413	0,121(28,4%); 0,244(26,52%); 0,964(14,6%); 1,408(20,8%);
3	Am241	1006	2003.09.01	1,58E+05	d	4,39E-06	2009.07.06	996,612660	0,026(2,4%) 0,059(35,9%);
4	Ba133	1007	2003.09.01	3862	d	1,79E-04	2009.07.06	686,457029	0,080(34,1%); 0,302(18,32%); 0,356(62,0%);
5	Cs137	1039	2003.09.01	1,10E+04	d	6,29E-05	2009.07.06	908,436135	0,662(85,2%);
<b>A Bolyai Kar "Oxford" izotópjai</b>									
6	Ba133	37	1996.11.01	3832	d	1,81E-04	2009.07.06	16,024982	0,080(34,1%); 0,302(18,32%); 0,356(62,0%);
7	Cs137	37	1996.11.01	1,10E+04	d	6,29E-05	2009.07.06	27,658886	0,662(85,2%);
8	Co60	37	1996.11.01	1920	d	3,61E-04	2009.07.06	6,964783	1,173(99,89%); 1,332(99,98%);
9	Na22	37	1996.11.01	949	d	7,30E-04	2009.07.06	1,261245	0,511(180,5%); 1,275(99,93%);

5. melléklet: A gamma spektrumok felvételéhez rendelkezésre álló izotópok és ezek adatai

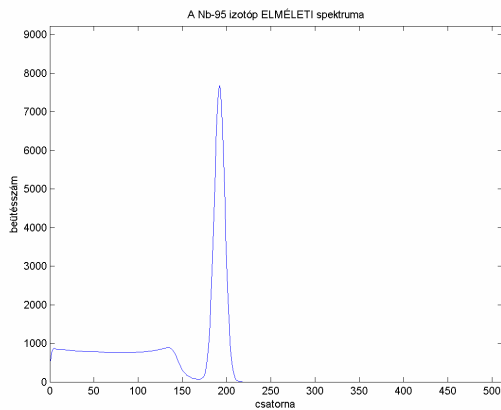
## 6. melléklet:



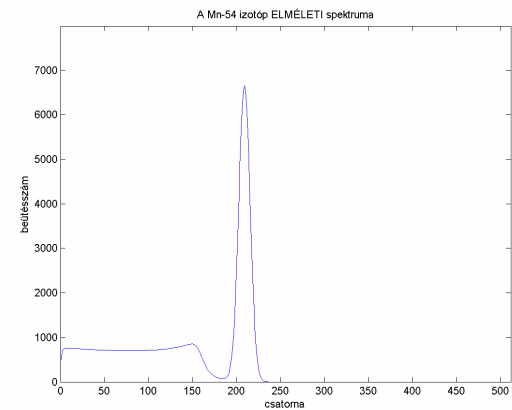
a)



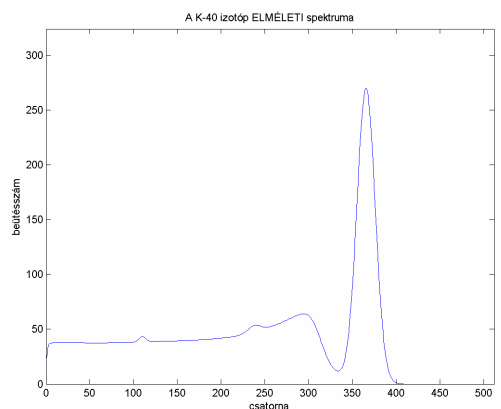
b)



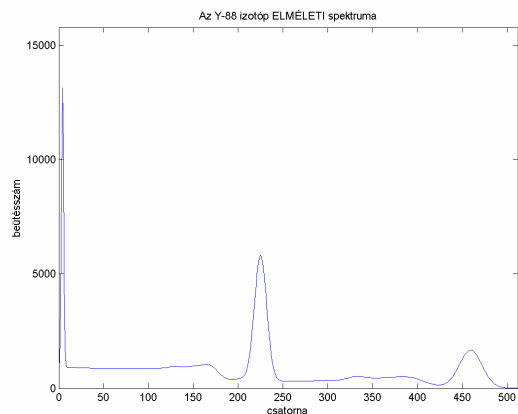
c)



d)



e)



f)

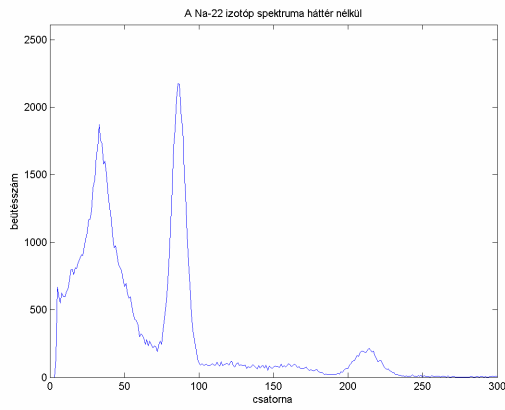
6. melléklet: A [www.nucleonica.net](http://www.nucleonica.net) weboldalon generált ideális elméleti spektrumok, 10 perc mérési időtartam és  $A = 100\text{ kBq}$  aktivitás esetén, standard  $7,62\text{ cm} \times 7,62\text{ cm}$  méretű NaI szcintillátorral  
a) Cr51; b) Sr85; c) Nb95; d) Mn54; e) K40; f) Y88;  
(A spektrumok nem az elemek rendszáma, hanem a növekvő gamma-energia szerint követik egymást)

**7. melléklet:**

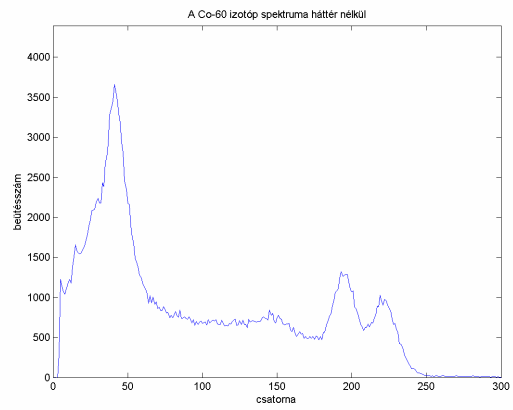
<b>Z</b>	<b>Izotóp</b>	<b>Energia (MeV)</b>	<b>Csúcspozíció</b>	<b>Szórás (csatorna)</b>	<b>Nettó csúcsterület (beütésszám)</b>	<b>Összes beütésszám</b>
19	K40	1,460	365,33	10,65	$6,6764 \cdot 10^3$	$2,1311 \cdot 10^4$
24	Cr51	0,320	80,32	3,31	$2,2822 \cdot 10^4$	$2,8298 \cdot 10^4$
25	Mn54	0,834	209,13	6,46	$1,0450 \cdot 10^5$	$2,3076 \cdot 10^5$
38	Sr85	0,514	128,96	4,41	$1,5889 \cdot 10^5$	$2,8487 \cdot 10^5$
39	Y88	0,898	224,89	7,50	–	–
		1,836	459,31	12,89	–	–
41	Nb95	0,765	191,87	6,04	$1,1284 \cdot 10^5$	$2,3552 \cdot 10^5$

**7. melléklet: A [www.nucleonica.net](http://www.nucleonica.net) weboldalon generált ideális elméleti spektrumok alapján számított csúcspozíciók és szórások a kalibrációs függvények paramétereinek meghatározásához**

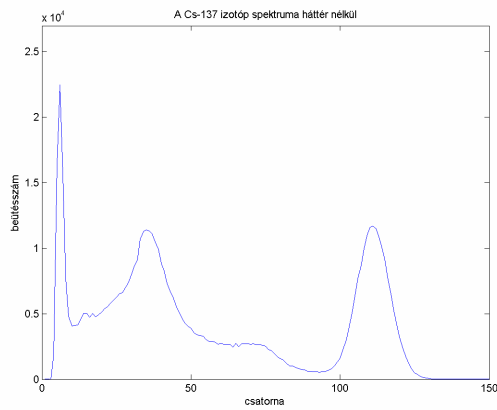
## 8. melléklet:



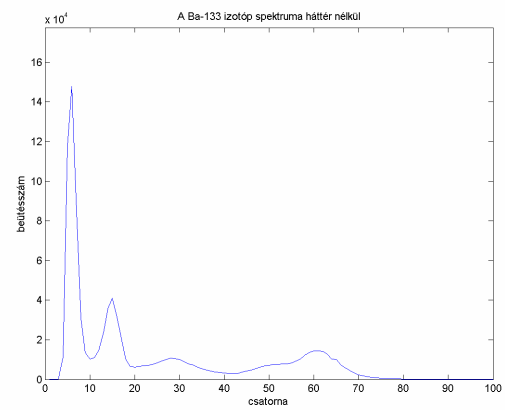
a)



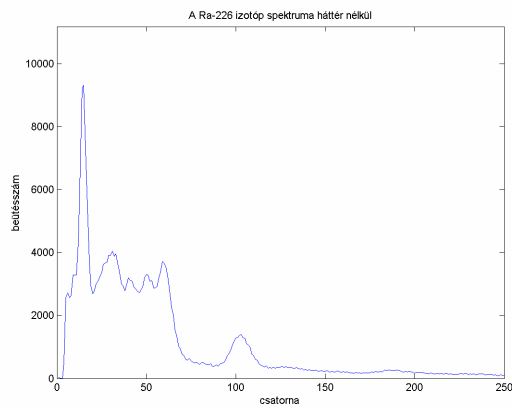
b)



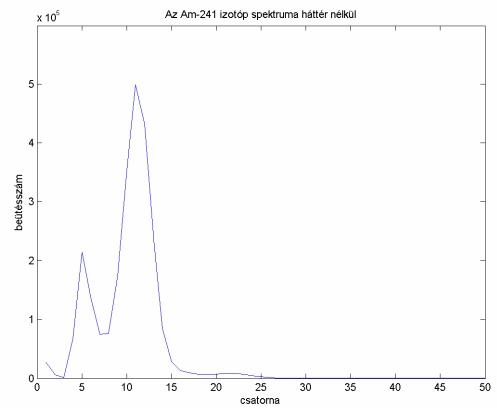
c)



d)



e)



f)

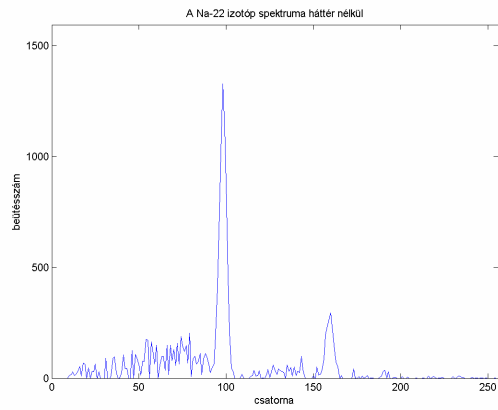
**8. melléklet: Az IH-111L, 512-csatornás szcintillációs detektorral,  
10 perc időtartam alatt felvett spektrumok  
a) Na22; b) Co60; c) Cs137; d) Ba133; e) Ra226; f) Am241;  
(A spektrumoknak minden esetben csak a lényeges részét ábrázoltuk,  
elhagytuk azon tartományt, ahol a csatornák tartalma gyakorlatilag nulla)**

**9. melléklet:**

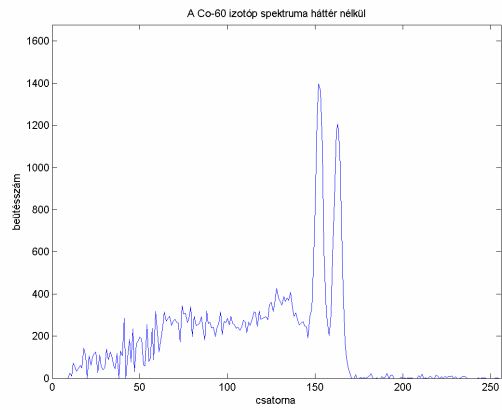
<b>Z</b>	<b>Izotóp</b>	<b>Energia (MeV)</b>	<b>Csúcspozíció</b>	<b>Szórás (csatorna)</b>	<b>Félérték szélesség (csatorna)</b>
11	Na22	0,511	86,37	4,97	11,70
		1,275	212,30	8,61	20,28
27	Co60	1,173	194,80	9,39	22,12
		1,332	220,87	9,26	21,80
55	Cs137	0,662	111,07	5,55	13,084
56	Ba133	0,303	52,56	6,65	15,678
		0,356	60,41	4,99	11,76
88	Ra226	0,352	50,68	5,72	13,47
		0,609	102,59	6,44	15,16
		1,120	185,65	12,03	28,33
		1,764	291,56	16,50	38,86
95	Am241	0,026	5,48	1,06	2,51
		0,059	11,17	1,79	4,21

**9. melléklet: Az IH-111L detektorral felvett spektrumok alapján számított csúcspozíciók és szórások a kalibrációs függvények paramétereinek meghatározásához**

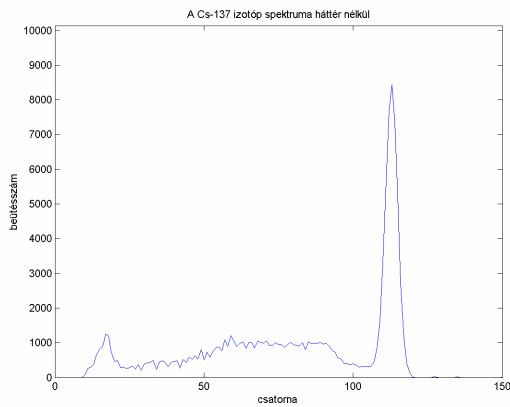
## 10. melléklet:



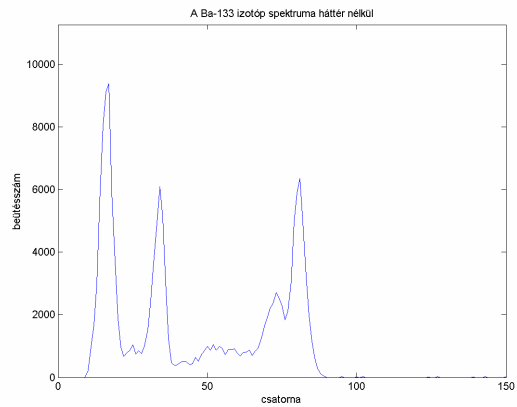
a)



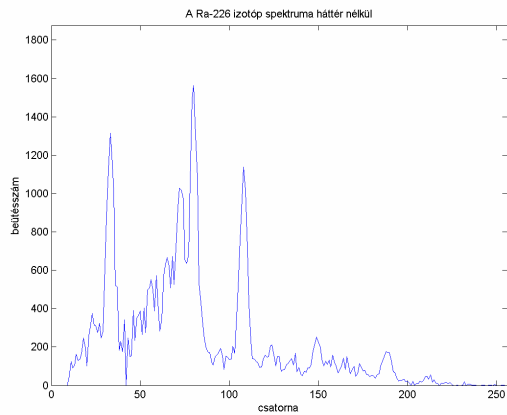
b)



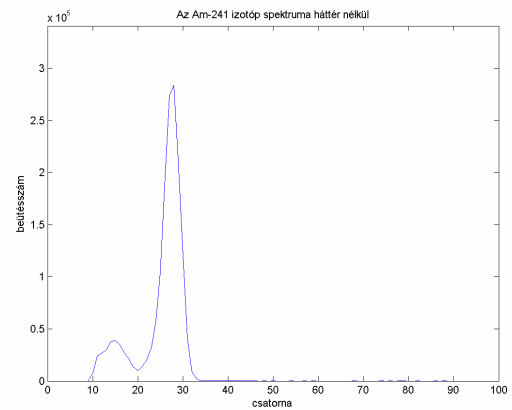
c)



d)



e)



f)

**10. melléklet: A „Berkeley”, 256-csatornás szcintillációs detektorral, 5 perc időtartam alatt felvett spektrumok**  
**a) Na22; b) Co60; c) Cs137; d) Ba133; e) Ra226; f) Am241;**  
**(A spektrumoknak minden esetben csak a lényeges részét ábrázoltuk, elhagytuk azon tartományt, ahol a csatornák tartalma gyakorlatilag nulla)**

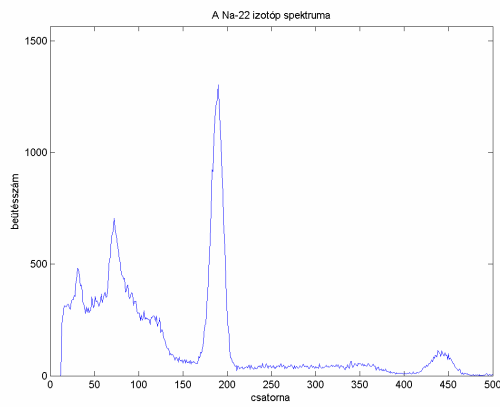


**11. melléklet:**

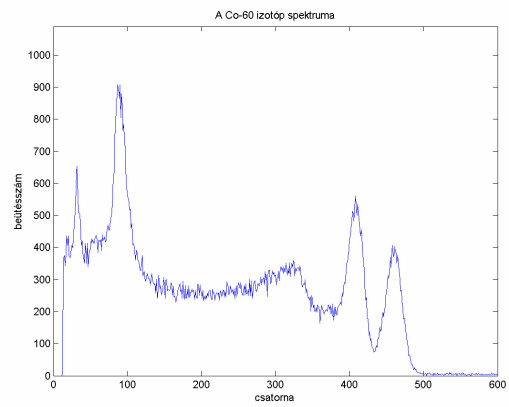
<b>Z</b>	<b>Izotóp</b>	<b>Energia (MeV)</b>	<b>Csúcspozíció</b>	<b>Szórás (csatorna)</b>	<b>Félérték szélesség (csatorna)</b>
11	Na22	0,511	98,11	2,05	4,82
		1,275	158,91	1,20	2,84
27	Co60	1,173	152,15	2,37	5,58
		1,332	162,68	2,41	5,67
55	Cs137	0,662	112,74	2,15	5,07
56	Ba133	0,303	73,33	2,93	6,91
		0,356	80,49	2,33	5,48
88	Ra226	1,120	149,17	2,80	6,61
		1,764	188,46	2,66	6,26
95	Am241	0,026	14,82	1,49	3,51
		0,059	27,04	1,75	4,12

**11. melléklet: A „Berkeley”-detektorral felvett spektrumok alapján számított csúcspozíciók és szórások, a kalibrációs függvények paramétereinek meghatározásához**

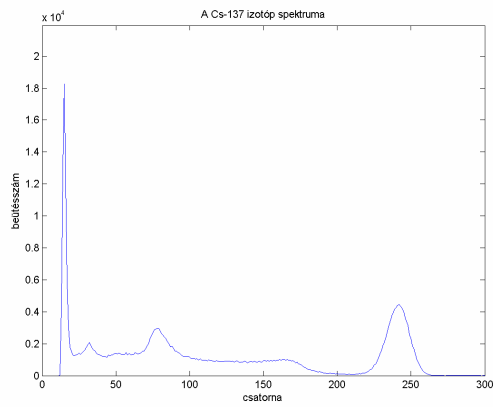
## 12. melléklet:



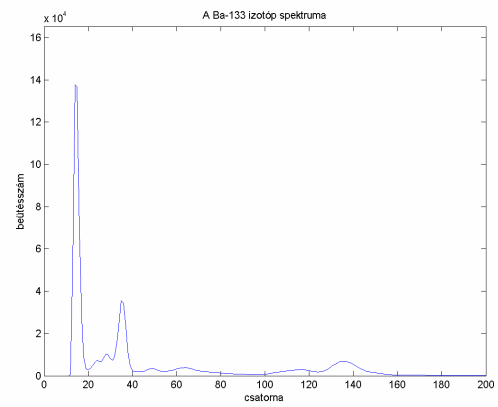
a)



b)



c)



d)

**12. melléklet: A „GAMMA” ND-131/D, 1024-csatornás szcintillációs detektorral,  
5 perc időtartam alatt felvett spektrumok**

**a) Na22; b) Co60; c) Cs137; d) Ba133;**

**(A spektrumoknak minden esetben csak a lényeges részét ábrázoltuk,  
elhagytuk azon tartományt, ahol a csatornák tartalma gyakorlatilag nulla)**

**13. melléklet:**

Z	Izotóp	Energia (MeV)	Csúcspozíció	Szórás (csatorna)	Félérték szélesség (csatorna)
11	Na22	0,511	188,45	6,92	16,29
		1,275	442,01	11,47	27,03
27	Co60	1,173	408,01	12,43	29,28
		1,332	459,65	11,39	26,82
55	Cs137	0,662	241,23	7,67	18,08
56	Ba133	0,081	28,55	3,03	7,12
		0,303	116,34	5,71	13,46
		0,356	135,81	6,47	15,23

13. melléklet: A „GAMMA” ND-131/D detektorral felvett spektrumok alapján számított csúcspozíciók és szórások a kalibrációs függvények paramétereinek meghatározásához

**14. melléklet: A Compton-kontinuum parabolákkal történő közelítéséhez a 0–1MeV tartományban**

Izotóp	Foto-energia (MeV)	Min. hely (csat.)	Min $\times 10^{-3}$	Maxb $\times 10^{-3}$	Arányb	Maxj $\times 10^{-3}$	Arányj
Cr51	0,320	31	2,9129	5,4778	1,8805	4,4625	1,5320
Sr85	0,514	62	3,2274	4,7124	1,4601	4,0838	1,3653
Nb95	0,765	81	3,2235	3,7537	1,1645	3,9491	1,2251
Mn54	0,834	86	3,0391	3,3711	1,1092	3,6809	1,2112

14. melléklet: A Compton-tartományt közelítő parabolák paraméterillesztéséhez szükséges adatok a 0-1 MeV tartományban egy 512 csatornás detektor esetében. A „b” és „j” rövidítések a Compton –tartomány bal és jobb végpontjára utalnak, mely adatokat legkisebb négyzetek módszerével illesztett parabolák extrapolációjával kaptuk.