

HANKA LÁSZLÓ—DR. HABIL. VINCZE ÁRPÁD

**GAMMA-SPEKTRUMOK KIÉRTÉKELÉSÉNEK
MATEMATIKAI MÓDSZEREI I.
A „KLASSZIKUS” VAN CITTERT-FÉLE ÉS
A GOLD-FÉLE ITERÁCIÓ**

**MATHEMATICAL METHODS OF
GAMMA-SPECTRUM'S EVALUATION I.
VAN CITTERT ITERATION ALGORITHM AND
GOLD-DECONVOLUTION METHOD**

A tényleges és a méréssel kapott gamma-spektrum kapcsolatát egy lineáris egyenletrendszerrel írhatjuk le. Ennek az egyenletrendszernek a megoldása — amelyet dekonvolúciónak nevezünk —, egy összetett probléma, ugyanis a megoldás a mérési hibák következtében instabilis. Ennek az az oka, hogy az egyenletrendszer mátrixa szinguláris, ezért a megoldás nagyon érzékeny a hibákra. A mérési hibák létezése és a rendszer együtthatómátrixának szingularitása jelentős mértékben befolyásolja az alkalmazható dekonvolúciós módszerek hatékonyságát. Ebben a dolgozatban a fizikai és matematikai alapok ismertetése után, a klasszikusnak számító, Van Cittert-től származó iterációs eljárást mutatjuk be, majd ennek egy stabilisabb, a hibákra kevésbé érzékeny módosított változatát, a Gold-algoritmust ismertetjük. Kulcsszavak: Gamma spektrum, szcintillációs detektor, válaszfüggvény, dekonvolúció, „rosszul kitűzött” problémák, „rosszul kondicionált” problémák, Van Cittert algoritmus, Gold-dekonvolúció.

The relationship between incident and observed spectrum can be described by a linear equation system. The solution of this system (called deconvolution), is generally a complex problem, because the solution is unstable with respect to the measurement error. The equation system is extremely sensitive to errors in the measured data, because the matrix of the system is always singular. The existence of error and the singularity of the system-matrix affects the process of deconvolution, and can lead to difficulties in solving the equation system. This work first of all describes physical and mathematical background of this problem, after that presents the classical Van Cittert iteration algorithm, and the much more stable Gold-deconvolution method, which is significantly less sensitive to errors in the data. Keywords: Gamma-ray spectra, scintillation detector, response function, deconvolution, „ill-posed” problems, „ill-conditioned” problems, Van Cittert algorithm, Gold-deconvolution.

1. Bevezetés

Jelenleg a terepi körülményeknek leginkább megfelelő, egyszerű szcintillációs detektorrendszerek fejlesztése ismét előtérbe került. A kiváló robosztusság és hatásfok mellett a rosszabb felbontás miatt az így felvett spektrumok kiértékelése — összetett forrás esetében — nem egyszerű feladat, mert a szcintillációs műszerek, felépítésük folytán, összetett spektrumokat szolgáltatnak, a közeli energiáknál fellépő csúcsokat egybemossák [1].

Cél az eszközrendszer használhatóságának, tulajdonságainak vizsgálata, a hatékonyság fejlesztése, az alkalmazási kör kiterjesztése, új kiértékelési algoritmusok kidolgozása.

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; lumineszkáló katonai eszközök ellenőrzése) során a potenciálisan veszélyeztetett vagy misszióban közreműködő katonai erők sugárvédelme szempontjából alapvető 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 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.

A fizikában és a gamma-csillagászatban már alkalmaznak ehhez különböző módszereket, technikákat: maximum-entrópia módszere, a maximális valószínűség becslésének módszere, lineáris közelítő eljárások. Ezért cél az ilyen technikák összehasonlító vizsgálata, továbbfejlesztése

és adaptálása a katonai alkalmazások területére. Ezzel a dolgozat egy olyan cikksorozat első része, amely ezen dekonvolúciós technikák matematikai módszereit tárgyalja részletesen. Ezekben részletesen bemutatjuk a módszerek matematikai hátterét, és levezetjük azokat az összefüggéseket, amelyek már közvetlenül alkalmazhatók a dekonvolúció végrehajtására, más szavakkal a tényleges spektrum előállítására.

A γ -sugárzás és az anyag kölcsönhatásai közül az alábbi gyakorlati és elméleti szempontból egyaránt legfontosabb három típust említjük vázlatosan: Fotoeffektus, Compton-szórás, Párkeltés. Ez a három folyamat egymástól független.

Fotoeffektus során a γ -foton teljes energiáját átadja egy atomban kötött elektronnak. Ennek következtében az atom elektront emittál, az elektron $E_e = E_\gamma - E_k$ energiával hagyja el az atomot, ahol E_γ a foton energiája, E_k pedig az elektron kötési energiája.

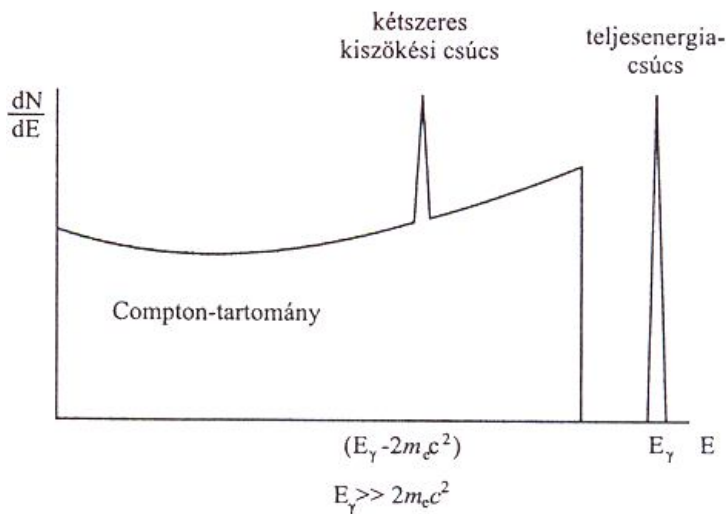
A fotoeffektus alacsony energiáknál jelentős, de ez erősen függ az anyagi minőségtől. Például Al esetében $E_\gamma < 0,05$ MeV, Pb esetében pedig $E_\gamma < 0,5$ MeV energiánál. A fotoeffektus bekövetkezésének valószínűsége növekvő energiáknál rohamosan csökken.

Növekvő („közepes”) energiáknál egyre jelentősebb kölcsönhatás a Compton-szórás. Ez lényegében γ -fotonok szóródása szabadnak tekinthető atomi elektronokon. A bemenő γ -foton energiája és impulzusa a meglökött elektron és a szórt foton között oszlik meg.

A párkeltés során a nagy energiájú γ -foton egy atommag terében megsemmisül, és elektron-pozitron pár keletkezik. A létrejött részecskepár E kinetikus energiája: $E = hv - 2m_0c^2$, ahol hv a foton energiája, a $2m_0c^2$ pedig az elektron-pozitron pár együttes nyugalmi energiája.

A folyamat létrejöttének energetikai feltétele természetesen az, hogy teljesüljön a $hv > 2m_0c^2 = 1,02$ MeV egyenlőtlenség. A folyamat szabad elektronon nem jöhet létre, szükség van egy nagy tömegű magra, amelynek a terében van az elektron.

Mint látható, a gamma sugárzás és az anyag kölcsönhatása összetett folyamat, bizonyos valószínűséggel mindhárom említett folyamat végbemegegy minden gamma foton esetében, így ennek megfelelően a gamma-spektrum szerkezete is meglehetősen bonyolult. Az 1. ábrán egy elméleti monoenergiás gamma-spektrumalak látható, ahol az egyes kölcsönhatásoknak megfelelő részletek világosan láthatók (teljesenergia csúcs = fotocsúcs).



1. ábra

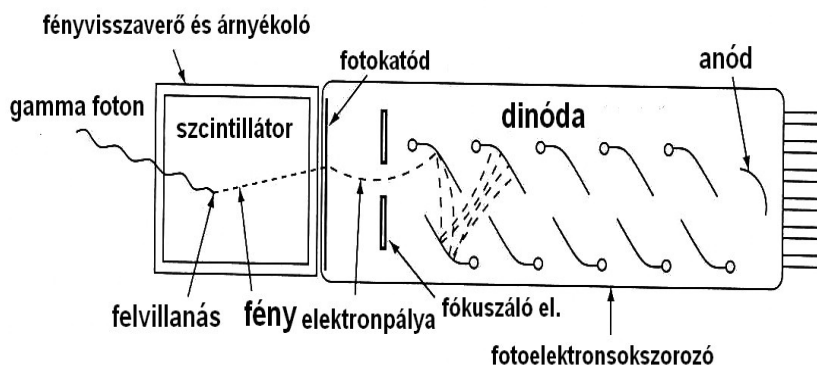
Már rövidebbel a radioaktivitás felfedezése után, 1903-ban észlelték, hogy a cink-szulfid (ZnS) kristályok alfa-sugárzás hatására fényt sugároznak ki, azaz szcintillálnak. A jelenséget 1908-ban alkalmazták először alfa-részecskék számlálására, azonban annak ellenére, hogy Ernst Rutherford javított a megfigyelési technikán, még több mint három évtizedet kellett várni arra, hogy az eljárást gamma sugárzás vizsgálatára is alkalmazhassák.

Bay Zoltán ugyanis csak 1939-40-ben dolgozta ki a fotoelektron sokszorozót, amely a gamma spektrométer egyik legfontosabb részegysége. A napjainkban is alkalmazott szcintillációs mérési módszert a fenti alapokon 1945-48-ban Dreyfus, Blau és Hofstadter dolgozták ki. Szcintillátorként Talliummal aktivált nátrium-jodidot alkalmaztak [NaI(Tl)].

0,1%-os szennyezés a kristály fizikai tulajdonságait (sűrűség, olvadáspont) nem változtatja meg, de az emissziós színkép maximuma a látható tartományba kerül (303 nm-ről 420 nm-re növekszik) és az utánvilágítási idő négy nagyságrenddel megnő (10^{-7} s-ról 10^{-3} s-ra).

A Talliummal aktivált NaI transzformációs hatásfoka a legnagyobb a ZnS után, mintegy 8%. A jól ismert, ezüsttel aktivált ZnS fényhozama 28%, de ebből az anyagból nem lehet nagyméretű egykristályt készíteni,

márpedig ez egy nagy hatásfokú spektrométernek elengedhetetlen feltétele. A 2. ábrán látható egy szcintillációs detektor vázlatos felépítése.



2. ábra

Ennek fő részei tehát egy nagy méretű szcintillátor egykristály (kb. 5·5 cm méretű körhenger), a fotokatód, az elektronoptikai rendszer, az elektronsokszorozó, az anódon gyűlnek össze az elektronok, majd egy előerősítő, utána egy főerősítő és végül a jelek összegyűjtésére illetve szétválogatására egy diszkriminátor és számláló, vagy egy sokcsatornás analízátor.

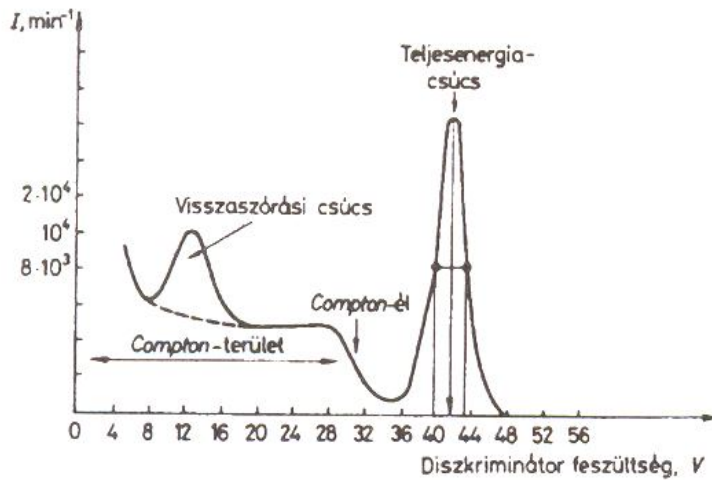
Mint az 1. ábrán látható, még egy monoenergiás γ -sugárzás spektruma is nagyon összetett, bonyolult szerkezetű, nem is beszélve összetett sugárforrások esetén detektált spektrumokról.

Erre még rátevéődik a háttérsugárzás γ -fotonjainak folytonos spektruma és az egész mérést zavarja a szcintillációs detektor sötétárama, ami abból adódik, hogy a fotokatód kis valószínűséggel fotonok nélkül is kibocsát elektronokat, valamint a dinódák termikus emissziójából is származnak elektronok. Ezeknek a statisztikus folyamatoknak köszönhetően a detektált energiák nem esnek egybe pontosan a kibocsátott energiákkal.

A tényleges értékek körül szóródnak a mért értékek, a vonalak kiszélesednek, egy vonalnak egy Gauss-görbe felel meg, a spektrum a bonyolult elektronikai rendszernek köszönhetően torzul.

A spektrumot még tovább bonyolítja, hogy a gamma fotonok szóródhatnak a szcintillátort körülvevő szerkezeti anyagokon, így „visszaszórással” bekerülhetnek a detektorba. A 3. ábrán egy tipikus, szcintillá-

ciós detektorral felvett, monoenergiás gamma-spektrum látható. (Vessük össze ezt az 1. ábrán látható elméleti spektrummal!)



3. ábra (A Cs-137 gamma-spektruma, $E = 0,66 \text{ MeV}$)

Térjünk rá ezek után a spektrumkiértékelés matematikai módszereinek vizsgálatára. Egy gamma spektrum meghatározása a mérési adatok alapján lényegében egy lineáris egyenletrendszer megoldását jelenti. Ha $y \in \mathbb{R}^m$ az m -csatornás spektrométerrel mért spektrum, $x \in \mathbb{R}^n$ a valós spektrum, az $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mátrix pedig a detektor válaszfüggvénye (Response function), akkor a megoldandó probléma $y = Rx$ alakban írható fel [2]. Az egyenletrendszer $R = [R_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ együtthatómátrixának R_{ij} eleme annak az eseménynek a valószínűsége, hogy a j -edik energiatartományba eső γ -foton az i -edik csatornában lesz detektálva.

Az alábbiakban az R mátrixot ismertnek tételezzük fel. Ha egy konkrét mérési eljárásra hivatkozunk, amikor is például $m = 1024$ és $n = 256$, akkor ez azt jelenti, hogy egy 1024-csatornás analízátorral végezzük a méréseket, a mérendő energiatartományt pedig 256 részre osztjuk.

Tehát a mérési gyakorlatban $m > n$, ami azt jelenti, hogy egy túlhatározott egyenletrendszer megoldása szolgáltatja az x spektrumot, azaz nagyobb az egyenletek száma mint az ismeretleneké. Ebben a dolgozatban ezen egyenletrendszer megoldásának vizsgálatával, a megoldás matematikai módszereivel foglalkozunk.

Az egyenletrendszer megoldása lényegében egy inverz-probléma. A szakirodalom az eljárást dekonvolúciónak nevezi. Abban az esetben, ha az R mátrix kvadratikus ($R \in \mathbb{R}^{n \times n}$) és reguláris, a megoldás azonnal megkapható: $x = R^{-1}y$. Ez a gyakorlatban szinte sohasem teljesül.

Mivel az R mátrix nem kvadratikus, így nem létezik közvetlenül inverze, ezen túlmenően az oszlopvektorok nem lineárisan függetlenek, azaz $\rho = \text{rang}(R) < n$, ami azt jelenti, hogy ha van megoldás az nem egyértelmű, végtelen sok megoldás közül kell kiválasztani a legmegfelelőbbet. Ezen kívül az $y \in \mathbb{R}^m$ mérési eredmények hibával terheltek, az inverz probléma megoldását a hibás $y^\delta \in \mathbb{R}^m$ vektorból kell meghatározni, és mint látni fogjuk a gyakorlatban előforduló esetekben a dekonvolúció nagyon érzékeny a hibákra.

Az ilyen típusú inverz problémákkal kapcsolatosan Hadamard szerint három lényeges kérdés illetve probléma merül fel [3]:

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” („well-posed”), ha valamelyik tulajdonság nem teljesül, akkor „rosszul kitűzött” („ill-posed”) matematikai problémának nevezzük.

2. Rosszul kondicionált problémák

Mint látni fogjuk, az inverz feladat megoldásának tulajdonságait, sőt magát a megoldási módszert is alapvetően befolyásolják a mátrix sajátértékei. Sajátértéke kvadratikus mátrixnak létezik, ezért első lépésként tegyük fel, hogy $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, tehát az A mátrix kvadratikus.

Ezáltal nem csorbítjuk az általánosságot, továbbá azáltal sem, ha csak valós sajátértékeket és valós komponensű sajátvektorokat tételezünk fel, mert a bevezetőben említett dekonvolúciós probléma ilyen esetekre vezet.

Legyen $\lambda_i \in \mathbb{R}$ az A sajátértéke, $u_i \in \mathbb{R}^n$ pedig a λ_i sajátértékhez tartozó sajátvektor [4]. Ekkor teljesül, hogy $Au_i = \lambda_i u_i$. Ha az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix reguláris – ez egyenértékű azzal, hogy minden sajátértéke különbözik 0-tól –, akkor létezik az $A^{-1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ inverzmátrix, mellyel teljesülnek az $A^{-1}u_i = \lambda_i^{-1}u_i$, ($i = 1, 2, \dots, n$) egyenlőségek. Ami azt jelenti, hogy az A^{-1} inverzmátrix sajátvektorainak halmaza egybeesik az A sajátvektorainak halmazával, a sajátértékek pedig A sajátértékeinek reciprokai. Ha az A mátrixnak van n db lineárisan független sajátvektora – ami teljesül, ha van n db különböző sajátértéke –, az A mátrix diagonális alakra hozható. Legyen $U = [u_1, u_2, \dots, u_n]$ az a mátrix, melynek oszlopai a sajátvektorok, ekkor az $U^{-1}AU = \langle \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n \rangle =: \Lambda$ diagonális mátrix főátlójában a sajátértékek szerepelnek.

A későbbi vizsgálatok érdekében tegyük még fel, hogy az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix szimmetrikus ($a_{ij} = a_{ji}$, minden (i, j) idexpárra), és pozitív definit (ami azt jelenti, hogy az $\langle Ax, x \rangle$ skaláris szorzat értéke, minden nullvektortól különböző $x \in \mathbb{R}^n$ esetén pozitív. Ez egyenértékű azzal, hogy az A mátrix minden sajátértéke pozitív. Ha tetszőleges $x \in \mathbb{R}^n$ esetén nem negatív a skaláris szorzat értéke, akkor a mátrix pozitív szemidefinit.) Az egyszerűség kedvéért állapodjunk meg abban, hogy a sajátértékek nagyság szerinti sorrendben a következők: $0 < \lambda_n \leq \lambda_{n-1} \leq \dots \leq \lambda_1$, és a skálázást válasszuk olyannak, hogy $\lambda_1 = 1$ legyen. Ebben az esetben az $\{u_i\}$, ($i = 1, 2, \dots, n$) sajátvektorok ortogonális rendszert alkotnak, azaz $\langle u_i, u_j \rangle = \delta_{ij}$ (δ_{ij} a Kronecker-féle delta szimbólum, értéke 1 ha $i = j$ és 0 különben). Ismét nem csorbítjuk az általánosságot, ha feltesszük, hogy a sajátvektorok normáltak, azaz $\|u_i\| = 1$, ($i = 1, 2, \dots, n$). Ebből az következik, hogy az $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix ortogonális, tehát $U^{-1} = U^*$, U inverze megegyezik a transzponáltjával. Ebben az esetben a mátrixok spektrális felbontására vonatkozó tétel szerint az A mátrix diádok összegeként állítható elő, és hasonló áll az inverz mátrixra is [4]:

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i u_i u_i^* ; \text{ valamint: } A^{-1} = \sum_{i=1}^n \lambda_i^{-1} u_i u_i^*$$

(Itt $u_i u_i^*$ jelöli a két vektor diadikus szorzatát, tehát azt $n \times n$ méretű mátrixot, mely mátrix k -adik sorának j -edik eleme az u_i vektor k -adik és j -edik koordinátájának szorzata!) Mátrixos írásmóddal $A = U \Lambda U^*$, ahol a Λ diagonális mátrix főátlójában a sajátértékek van-

nak. Ebben az esetben egy $Ax = y$ egyenletrendszer megoldása az alábbi alakban írható fel:

$$(2.1) \quad x = A^{-1}y = \sum_{i=1}^n \lambda_i^{-1} u_i u_i^* y$$

Tegyük most fel, hogy a mérési adatok y^δ hibával terheltek, „zajosak”: $y^\delta \in \mathbb{R}^n$ mérési adatokkal rendelkezünk az $y \in \mathbb{R}^n$ helyett. Tegyük fel, hogy a hibakorlát δ , azaz $\|y^\delta - y\| < \delta$, Euklideszi normában. Az y^δ „jobboldal” esetén jelölje a megoldást x^δ . A spektrális előállítás felhasználásával azt kapjuk, hogy

$$(2.2) \quad x^\delta - x = \sum_{i=1}^n \lambda_i^{-1} u_i u_i^* (y^\delta - y)$$

Becsüljük meg az $x^\delta - x$ eltérés normáját! Mivel az ortogonalitás miatt $UU^* = E$, ($E \in \mathbb{R}^{n \times n}$ az egységmátrix), az adódik, hogy

$$\begin{aligned} \|x^\delta - x\|^2 &= \langle UA^{-1}U^*(y^\delta - y), UA^{-1}U^*(y^\delta - y) \rangle = \langle (y^\delta - y), UA^{-1}U^*UA^{-1}U^*(y^\delta - y) \rangle = \\ &= \langle (y^\delta - y), UA^{-2}U^*(y^\delta - y) \rangle \leq \lambda_n^{-2} \langle (y^\delta - y), UEU^*(y^\delta - y) \rangle = \lambda_n^{-2} \langle (y^\delta - y), (y^\delta - y) \rangle = \\ &= \lambda_n^{-2} \|y^\delta - y\|^2 \end{aligned}$$

ahol megállapodásunk szerint λ_n a legkisebb sajátérték. Vezessük be a $\kappa = \frac{\lambda_1}{\lambda_n} = \frac{1}{\lambda_n}$ hányadossal az A mátrix kondíciószámát, ami tehát a maximális és a minimális sajátérték hányadosa. Mint látható, a kondíciószám határozza meg a dekonvolúció eredményének abszolút hibáját. Ha a mérési adatok hibásak, akkor

$$(2.3) \quad \|x^\delta - x\| \leq \kappa \|y^\delta - y\| \leq \kappa \cdot \delta$$

Ez a becslés meglehetősen éles. Legyen ugyanis $y^\delta - y = \delta \cdot u_n$, tehát a hiba a legkisebb sajátértékhez tartozó sajátvektor δ -szorososa, a sajátvektorok normált volta miatt ekkor teljesül, hogy $\|y^\delta - y\| = \delta$. Az ortogonalításra hivatkozva azt kapjuk, hogy

$$x^\delta - x = \sum_{i=1}^n \lambda_i^{-1} u_i u_i^* \delta \cdot u_n = \lambda_n^{-1} u_n u_n^* \delta \cdot u_n = \lambda_n^{-1} \delta \cdot u_n = \kappa \cdot \delta \cdot u_n$$

tehát $\|x^\delta - x\| = \kappa \cdot \delta$. A hiba κ -szorosára növekszik. A (2.3) becslés tehát nem javítható. Másrészt, ha $y^\delta - y = \delta \cdot u_1$, tehát a hiba a legnagyobb sajátértékhez tartozó sajátvektor δ -szorososa, ebben az esetben is $\|y^\delta - y\| = \delta$ teljesül, akkor az előző gondolatmenettel adódik, hogy

$$x^\delta - x = \sum_{i=1}^n \lambda_i^{-1} u_i u_i^* \delta \cdot u_1 = \lambda_1^{-1} u_1 u_1^* \delta \cdot u_1 = \lambda_1^{-1} \delta \cdot u_1 = \delta \cdot u_1$$

vagyis ebben az esetben $\|x^\delta - x\| = \delta$, tehát az abszolút hiba nem növekszik. A kondíciósámnak tehát fontos szerepe van a dekonvolúció végrehajtásánál. Ha κ értéke nagy, akkor az

$$\|x^\delta - x\| \leq \kappa \|y^\delta - y\|$$

egyenlőtlenség miatt a megoldás hibája a mérési hiba κ -szorosára is nőhet, nagy κ érték esetén a hiba jelentős mértékű lehet! (Különleges esetben, mint például a Hilbert-féle mátrixoknál, a kondíciós szám extrém nagy érték is lehet [5]. A $H_n = [h_{ij}]$ Hilbert-mátrix az az n -edrendű kvadratikus mátrix, melyben

$$h_{ij} = \frac{1}{i+j-1}. \text{ A } H_{10} \in \mathbb{R}^{10 \times 10}$$

Hilbert-mátrix esetében például $\kappa \approx 10^{13}$). A fentiek általánosítása is igaz, a hiba nagy sajátértékek esetén kevésbé erősödik, mint kis sajátértékek esetében.

Vizsgáljuk most meg a szinguláris mátrix esetét. Eddig feltettük, hogy minden sajátérték pozitív. Most tegyük fel, hogy nagyság szerint az első $s-1$ db sajátérték zérus. A sajátértékek halmaza tehát $\{0, 0, \dots, 0, \lambda_s, \lambda_{s-1}, \dots, \lambda_1\}$. Ekkor az A mátrix $N(A)$ magtere (tehát az \mathbb{R}^n vektortér azon altere, amelyet az A mátrix a nullvektorra képez), nem triviális, tehát nem csak a nullvektort tartalmazza. Ebben az esetben közismert az $\mathbb{R}^n = N(A) \oplus R(A)$ összefüggés, ahol $R(A)$ az A lineáris transzformáció képtere [4]. A megoldás alakja formálisan most (2.1) helyett az alábbi:

$$x = \sum_{i=1}^s \lambda_i^{-1} u_i u_i^* y$$

Megoldás akkor és csak akkor létezik, ha $u_i^* y = 0$ ha $i > s$. Ha ismét figyelembe vesszük, hogy az adatok zajosak, y helyett y^δ -t mérjük, akkor elsőként tekintsük azt a P projekció operátort ($P^2 = P$), amely képezi az y^δ vetületét az $R(A)$ képtérre, majd becsüljük meg a megoldás hibáját. Ekkor (2.2) helyett a következő becslést kapjuk:

$$x^\delta - x = \sum_{i=1}^s \lambda_i^{-1} u_i u_i^* (P y^\delta - y)$$

Mivel $i \leq s$ esetén $u_i^* P y^\delta = u_i^* y^\delta$, ezért a korábbiaknak megfelelően kapjuk, hogy $\|x^\delta - x\| = \lambda_s^{-1} \cdot \delta$ a megoldás hibája. A mondottakból világos, hogy a hiba nem növekszik a magtérben. Az abszolút hiba ezek szerint a legkisebb nem nulla sajátérték által van meghatározva.

Ha az A mátrix κ kondíciószáma nagy, akkor az $Ax = y$ inverz feladatot rosszul kondicionálnak nevezzük. Az általunk vizsgált véges dimenziós probléma sohasem lehet „rosszul kitűzött” („ill-posed”) a Hadamard-féle 3. szempont szerint. Véges dimenzióban ugyanis a megoldás mindig folytonosan függ az adatoktól, de nagy kondíciós szám esetén a probléma közel úgy viselkedik, mintha a függés nem lenne folytonos.

3. Mátrix normája, a kondíciós szám általánosabb alakja

Egy $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix normáját az alábbi módon értelmezzük:

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

Ezzel egyenértékű az $\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$ egyenlőtlenség. Ez másképpen fogalmazva azt jelenti, hogy ha teljesül az $\|Ax\| \leq M \cdot \|x\|$ egyenlőtlenség, akkor $\|A\| \leq M$. Euklideszi normában az A mátrix normája az alábbi:

$$\|A\| = \sqrt{\lambda_{\max}(A^* A)}$$

Tehát a norma az $A^* A$ mátrix maximális sajátértékének a négyzetgyöke. Speciálisan, ha A szimmetrikus mátrix, akkor az egyszerűbb $\|A\| = \lambda_{\max}(A)$ egyenlőséget kapjuk, mivel ekkor A -nak és transzponáltjának ugyanazok a sajátértékei, az $A^* A$ sajátértékei pedig az A sajátértékeinek négyzetei.

Az előző pontban az abszolút hibáról nyilatkoztunk. Most az A normájának fogalmát használva becslést adunk a relatív hibára vonatkozólag. Tegyük fel, hogy A reguláris, továbbá $y \neq 0$ és a mérési hiba δy , azaz $y^\delta = y + \delta y$. Az $y + \delta y$ -hoz tartozó megoldás legyen $x + \delta x$.

Tehát $Ax = y$ és $A(x + \delta x) = y + \delta y$ valamint a linearitás miatt $A\delta x = \delta y$. Ekkor egyrészt teljesül, hogy $\|y\| = \|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$, másrészt pedig $\|\delta x\| = \|A^{-1} \delta y\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|\delta y\|$. E két egyenlőtlenség egybevetéséből azt kapjuk, hogy

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A^{-1}\| \|\delta y\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A^{-1}\| \|A\| \|\delta y\|}{\|y\|} = \|A^{-1}\| \|A\| \frac{\|\delta y\|}{\|y\|}$$

Ebben az általánosabb esetben az A mátrix kondíciószámának nevezzük a $\kappa = \|A^{-1}\| \cdot \|A\|$ szorzatot. Innen következik, hogy

$$(3.1) \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \kappa \frac{\|\delta y\|}{\|y\|}$$

ami azt jelenti, hogy a megoldás relatív hibája a mérés relatív hibájának κ -szorosára növekedhet. Be lehet bizonyítani, hogy a kondíciószám soha nem lehet kisebb, mint 1, tehát $\kappa \geq 1$, ami azt jelenti, hogy a relatív hiba nem csökkenhet. Világos, hogy szimmetrikus mátrix esetében

$$\kappa = \|A^{-1}\| \cdot \|A\| = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$$

ugyanis ekkor $\|A\| = \lambda_{\max}(A)$, $\|A^{-1}\| = \lambda_{\min}^{-1}(A)$. Ebben az esetben nyilvánvaló, hogy $\kappa \geq 1$. Az általános esetben azonban csak annyi teljesül, hogy

$$\kappa = \|A^{-1}\| \cdot \|A\| \geq \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$$

tehát, a maximális és minimális sajátérték hányadosa csak alsó korlát a kondíciószámra vonatkozólag. Tegyük most fel, hogy a mérés relatív

hibája $\frac{\|\delta y\|}{\|y\|} = 10^{-k}$. Legyen a kondíciószám $\kappa = 10^n$. Ekkor $\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} = 10^{n-k}$,

tehát $n = \lg \kappa$ azon decimális jegyek száma, amelyet elveszítünk, ha hibás jobboldallal számolunk.

4. A „klasszikus”

Van Cittert féle iterációs algoritmus

Az $Rx = y$ ($R \in \mathbb{R}^{m \times n}$) inverz feladatra alkalmazzuk elsőként a Van Cittert-től származó alábbi eljárást [6]. Mint azt az 1. pontban említettük, az R mátrix általában nem kvadrátikus (de ha a mérést úgy hajtjuk végre, hogy $m = n$ legyen, R akkor sem reguláris, és nem is szimmetrikus). Hogy invertálni lehessen a problémát, szorozzuk meg az egyenlet mindkét oldalát balról az $R^* \in \mathbb{R}^{n \times m}$ transzponált mátrixszal. Ekkor kapjuk az (4.1) $R^*Rx = R^*y$ Gauss-féle normálegyenletet ($R^*R \in \mathbb{R}^{n \times n}$). Itt

az együtthatómátrix már kvadratikus, sőt szimmetrikus és pozitív szemidefinit. (Ez indokolja, hogy vizsgálatainkban külön hangsúlyt fektetünk a szimmetrikus, pozitív szemidefinit mátrixokra.) Alkalmazzuk az $A = R^*R \in R^{n \times n}$ és az $y' = R^*y$ egyszerűsítő jelöléseket. Ezzel a megoldandó egyenletrendszer az $Ax = y'$ alakot ölti. (A továbbiakban y' helyett y -t írunk, ez nem okoz semmiféle félreértést!) Az $Ax = y$ inverz feladat általában rosszul kondicionált, így nagyon érzékeny a mérési hibára. Az alábbi algoritmus segítségével olyan megoldást adhatunk, amely kevésbé érzékeny a hibára.

Az $Ax = y$ egyenletrendszert $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ alakú iterációval oldjuk meg. Ha B független a k -tól – ebben az esetben az iterációt stacionáriusnak nevezzük –, akkor a konvergencia szükséges és elégséges feltétele az, hogy B spektrálsugarára, $\rho(B) = \max |\lambda(B)| < 1$ teljesüljön. Az iterációs formula az alábbi gondolatmenettel adódik: Legyen $A = C - D$ az A olyan felbontása, melyben C reguláris. Ekkor $Cx - Dx = y$ átrendezésével $Cx = Dx + y$ adódik. Ha ezt megszorozzuk balról C inverzével, akkor az $x = C^{-1}Dx + C^{-1}y$ egyenletet kapjuk. Vezessük be a $B = C^{-1}D$ és az $f = C^{-1}y$ egyszerűsítő jelöléseket. Így éppen az iterációra alkalmas $x = Bx + f$ alakot kapjuk. Közelebbről $B = C^{-1}(C - A) = E - C^{-1}A$, ahol $E \in R^{n \times n}$ az egységmátrix. A C mátrixot úgy célszerű megválasztani, hogy B normája kicsi legyen, mert ekkor a konvergencia gyors.

A Van Cittert-től származó algoritmus ennek az iterációnak az alábbi formája: (4.2) $x^{(k+1)} = (E - \mu \cdot A) \cdot x^{(k)} + \mu \cdot y$ A μ valós számot regularizációs tényezőnek nevezzük. Ebben az esetben tehát $B = E - \mu \cdot A$. Most az a feladat, hogy a μ paraméter értékét úgy válasszuk meg, hogy az iteráció konvergáljon. Legyen az iteráció kezdőértéke $x^{(0)} = \mu \cdot y$. Ekkor az egyes iterációs lépések eredménye a következő:

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= x^{(0)} + Bx^{(0)} = \mu y + B\mu y \\ x^{(2)} &= x^{(1)} + Bx^{(1)} = \mu y + B\mu y + B^2\mu y = \mu(y + By + B^2y) = \\ &= \mu(E + B + B^2)y \dots \\ x^{(k)} &= \mu(y + By + B^2y + \dots + B^k y) = \\ &= \mu(E + B + B^2 + \dots + B^k)y \dots \end{aligned}$$

Az A mátrix sajátértékei legyenek $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. Ekkor az $E - \mu \cdot A$ mátrix sajátértékei nyilvánvalóan a következők: $1 - \mu \cdot \lambda_1, 1 - \mu \cdot \lambda_2, \dots, 1 - \mu \cdot \lambda_n$. Vizsgáljuk meg, mi a k -adik iterációs lépésben kapott $x^{(k)}$ közelítés határértéke ha $k \rightarrow \infty$:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = \mu \left(E + B + B^2 + \dots + B^k + \dots \right) y = \mu \sum_{k=0}^{\infty} B^k y$$

A megoldást tehát egy mátrix-hatványsor állítja elő. Általánosan igaz, hogy a

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$$

mátrix-hatványsor konvergenciájának szükséges és elégséges feltétele, hogy az A mátrix λ_i sajátértékei mindannyian a

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$$

hatványsor konvergenciakörébe esnek. Ebben az esetben a valós hatványsorokra vonatkozó összegképletek érvényesek maradnak mátrixokra vonatkozólag is. Mivel a

$$\sum_{k=0}^{\infty} z^k$$

hatványsor konvergenciahalmaza a $|z| < 1$ körlap, a mátrix-hatványsor konvergenciájának szükséges és elégséges feltétele, hogy $|1 - \mu \cdot \lambda_i| < 1$ teljesüljön minden $i = 1, 2, \dots, n$ esetén. Mivel

$$\sum_{k=0}^{\infty} z^k = \frac{1}{1-z} = (1-z)^{-1},$$

ha $|z| < 1$, ezért kapjuk, hogy ha a sajátértékekre teljesülnek az előbbi feltételek, akkor

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x = \mu \left(\sum_{k=0}^{\infty} B^k \right) y = \mu (E - B)^{-1} y = \mu (\mu A)^{-1} y = A^{-1} y$$

Az iterációval tehát sikerül a dekonvolúciós problémát megoldani. Most már csak az a kérdés, hogy milyen feltételek esetén teljesülnek az $|1 - \mu \cdot \lambda_i| < 1$, ($i = 1, 2, \dots, n$) feltételek. Először vizsgáljuk az általános esetet, tegyük fel, hogy a sajátértékek között komplexek is előfordulhatnak. Legyen $\lambda_i = a_i + j \cdot b_i$. Ekkor $1 - \mu \cdot \lambda_i = (1 - \mu \cdot a_i) - j \cdot \mu b_i$. Egy komplex szám abszolút értékének négyzetét úgy kapjuk, hogy a komplex számot szorozzuk a konjugáltjával. Így adódik, hogy $|1 - \mu \cdot \lambda_i|^2 = [(1 - \mu \cdot a_i) - j \cdot \mu b_i] \cdot [(1 - \mu \cdot a_i) + j \cdot \mu b_i] = \mu^2 (a_i^2 + b_i^2) - 2\mu a_i + 1$. Ez akkor ki-

sebb, mint 1 minden i -re, ha teljesül, hogy $\mu[\mu(a_i^2 + b_i^2) - 2a_i] < 0$, ($i = 1, 2, \dots, n$). Ez az egyenlőtlenség μ -re vonatkozólag a következő megszorítást jelenti:

$$0 < \mu < \frac{2a_i}{a_i^2 + b_i^2}, (i = 1, 2, \dots, n),$$

ha $a_i > 0$. Ha most ismét figyelembe vesszük azt a tényt, hogy A szimmetrikus és pozitív szemidefinit, akkor ebből következően minden sajátérték valós, így $b_i = 0$, másrészt $\lambda_i = a_i \geq 0$. Ha még az is igaz, hogy A pozitív definit, akkor ez annyit jelent, hogy teljesülnie kell minden i -re a

$$(4.3) \quad 0 < \mu < \frac{2}{\lambda_i}$$

egyenlőtlenségnek. Legyen λ_{\max} az 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 adhatunk egy becslést. Az $Au_i = \lambda_i u_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$) sajátérték egyenletben az $u_i \in \mathbb{R}^n$ sajátvektor legnagyobb komponense legyen az $x_j \in \mathbb{R}$ valós szám. A sajátérték egyenlet j -edik komponense ekkor a

$$\sum_{p=1}^n A_{jp} x_p = \lambda_i x_j$$

alakot ölti, ahonnan

$$(4.4) \quad \lambda_i = \frac{\sum_{p=1}^n A_{jp} x_p}{x_j}$$

következik. Mivel x_j a fentiek szerint a legnagyobb komponens, ha a szummában minden x_p -t x_j -re cserélünk, akkor az alábbi egyenlőtlenséget kapjuk:

$$\lambda_i \leq \sum_{p=1}^n |A_{jp}|$$

($i = 1, 2, \dots, n$). A jobboldali összeg az A mátrix j -edik sorában található elemek abszolút értékeinek összege. A λ_{\max} sajátértéket, mint ezen

sorösszegek maximumát határozzuk meg. Ennek alapján választjuk meg a μ regularizációs paramétert. A Van Cittert algoritmus hátránya, hogy az alkalmazása során negatív megoldások is adódnak. Ennek a problémának a kiküszöbölése érdekében módosította Gold a fenti algoritmust az alábbi módon [7].

5. A Gold-féle dekonvolúciós algoritmus

Módosítsuk a Van Cittert algoritmust a (4.4) összefüggésre támaszkodva úgy, hogy a k -edik iterációs lépésben a

$$(5.1) \mu_i = \frac{1}{\lambda_i} = \frac{x_i^{(k)}}{\sum_{p=1}^n A_{jp} x_p^{(k)}}$$

definícióval választunk relaxációs paramétert. Ekkor természetesen teljesül (4.3), tehát a konvergencia biztosítva van. A (4.2) iterációs egyenletet hozzuk

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

alakra. Ennek az egyenletnek az i -edik koordinátájában μ helyére helyettesítsük (5.1) jobb oldalát:

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

Ha itt a zárójelet felbontjuk és összevonunk, akkor a következő iterációs formulát kapjuk:

$$(5.2) x_i^{(k+1)} = \frac{y_i}{\sum_{p=1}^n A_{jp} x_p^{(k)}} x_i^{(k)}$$

Ha az iteráció kezdőértékéül az $x^{(0)} = 1 \in \mathbb{R}^n$ vektort választjuk, és az (5.2) iterációs formulát alkalmazzuk, akkor kapjuk a Gold-féle dekonvolúciós eljárást [7]. Nagy előnye a Gold-féle dekonvolúciónak a Van Cittert algoritmushoz képest, hogy „pozitív szemidefinit”, azaz minden megoldás csak nem negatív komponensekből áll [8]. Ez nyilván alapvető követelmény a megoldással szemben, hiszen az $x \in \mathbb{R}^n$ vektor

lényegében egy γ -spektrum, a negatív megoldásoknak fizikailag nincs értelme. A Gold féle iterációs algoritmus a következőképpen működik a gyakorlatban:

- a) Meghatározzuk az iteráció nulladik lépésében a megoldást: $x^{(0)} = 1 \in \mathbb{R}^n$,
- b) Meghatározzuk az iterációs lépések számát (L); vagy előírunk egy feltételt arra vonatkozólag, hogy az iteráció melyik lépésben érjen véget. (Ha például adott $\varepsilon > 0$ esetén teljesül, hogy $\|x^{(L+1)} - x^{(L)}\| < \varepsilon$, akkor az $x^{(L)}$ megoldást fogadjuk el.),
- c) A Gold-algoritmus alkalmazásával meghatározzuk az $x^{(L)}$ megoldást,
- d) Mivel a Gold-féle iteráció a nulladik iterációtól függő stabilis nem negatív megoldáshoz vezet ezért az iteráció hatékonyságát fokozhatjuk azzal („boosted iteration”), ha új kezdőértékként az $x^{(L)}$ megoldás komponenseinek p-edik hatványát választjuk rögzített $p > 0$ -ra: $x^{(0)}_i = (x^{(L)}_i)^p$,
- e) Meghatározzuk, hogy hány iterációs sorozatot hajtunk végre (K), és visszatérünk a c) ponthoz. Végül a c) és d) pontokat alkalmazzuk egymás után K-szor.

Felhasznált irodalom

1. Bódizs Dénes: Atommagsugárzások mérés technikái. Typotex. 2006
2. L. Bouchet: A Comparative study of deconvolution methods for gamma-ray spectra. Astronomy & Astrophysics Supplement Series. Ser. 113, pp167-183.
3. <http://www.samsi.info/talks/inverse/Inverse-Vogel.pdf> (2007.12.17.)
4. Rózsa Pál: Lineáris algebra és alkalmazásai. Tankönyvkiadó. 1976
5. Stoyan Gisbert–Takó Galina: Numerikus módszerek, Typotex, 2006
6. P.H. Van Cittert, Z. Phys. 69 (1931) pp298.
7. M. Mandel, M. Morhac, J. Kilman, L. Krupa, V. Matousek, J.H. Hamilton, A.V. Ramayya: Decomposition of continuum gamma-ray spectra using synthesized response matrix. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 516 (2004) pp172-183.
8. M. Morhac: Deconvolution methods and their applications in the analysis of gamma-ray spectra. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 559 (2006) pp119-123.