

文章编号:1005-4642(2023)07-0050-06

学
生
园
地



基于粒子群算法的 γ 能谱重叠峰解析

闫晓雪, 王崇杰

(辽宁师范大学 物理与电子技术学院, 辽宁 大连 116029)

摘 要:针对传统 γ 能谱分析中最小二乘法中的迭代算法对初始峰参量要求较严格, 并且容易陷入局部最优等问题, 提出了基于粒子群算法的 γ 能谱重叠峰解析方法, 并且给出了重叠峰解析原理以及相应的算法. 模拟和实测 γ 能谱重叠峰的解析结果均表明: 在重叠峰的分离度较低的情况下, 该方法能够得到较高的解析精度, 并且具有较强的解析能力. 另外, 该方法还具有参量少、对初始参量要求宽松和算法易于实现等优点, 而且收敛于全局最优解, 因而是有用的 γ 能谱重叠峰解析方法.

关键词: γ 能谱分析; 重叠峰; 粒子群算法; 最小二乘法; 迭代法

中图分类号: O571.1; TP274

文献标识码: A

DOI: 10.19655/j.cnki.1005-4642.2023.07.009

γ 能谱分析技术是分析样品中放射性核素的种类及其放射性活度的主要技术手段, 其在地质探测、环境监测、放射医疗以及航空航天等领域有广泛应用^[1-4]. γ 能谱分析的主要任务为: 根据 γ 能谱中的全能峰峰位确定放射性核素的种类, 即定性分析; 根据全能峰峰面积计算相应核素的放射性活度, 即定量分析. 由于受谱仪系统能量分辨率的限制和测量环境温度等因素的影响, γ 能谱中常常存在重叠峰现象, 这给 γ 能谱分析带来了较大困难^[5]. 因此, 研究 γ 能谱重叠峰解析方法对提高 γ 能谱分析精度具有实际意义.

在传统 γ 能谱分析中, 通常采用非线性最小二乘法中的迭代算法对峰型函数进行拟合, 从而得到全能峰峰位和峰面积等参量. 由于迭代算法是局域优化算法, 对参量初始值要求较严格, 若初始参量设置不当, 迭代过程容易陷入局部最优, 因此会导致错误的分析结果^[6].

粒子群优化算法 (Particle swarm optimization, PSO) 是由 J. Kennedy 和 R. Eberhart 于 1995 年提出的全局优化算法^[7]. 该算法模拟了成群的鸟、鱼或蜜蜂等寻找食物的群体行为. 每个个体被视为 D 维空间中的 1 个粒子, 其位置坐标代表待解决问题的潜在解. 每个个体可根据自己

和同伴的飞行经验调整飞行方向直至找到食物, 即最优解. 粒子群算法具有适合求解多维问题、方程简单和参量少等优点. 此外, 与遗传算法、模拟退火算法等其他全局优化算法相比, 粒子群算法还具有收敛速度快的特点. 为此, 本文提出了基于粒子群算法的 γ 能谱重叠峰解析方法, 并给出了解析基本原理和算法. 利用该方法对模拟和实测的 HPGe γ 能谱重叠峰进行了解析, 并与传统迭代法进行了对比, 验证了该方法的可行性和有效性.

1 γ 能谱重叠峰解析原理及其粒子群算法

γ 能谱中 N 重峰的峰型函数可表示为^[1]

$$f(x, U) = \sum_{n=1}^N b_{n1} \exp \left[-\frac{(x - b_{n2})^2}{2b_{n3}^2} \right] + a_1 x^2 + a_2 x + a_3, \quad (1)$$

其中, b_{n1} , b_{n2} 和 b_{n3} 分别为第 n ($n=1, 2, \dots, N$) 个高斯峰的峰高、峰位和标准差; a_1 , a_2 和 a_3 为峰本底参量; 峰参量 $U = (b_{11}, b_{12}, b_{13}, b_{21}, b_{22}, b_{23}, \dots, b_{N1}, b_{N2}, b_{N3}, a_1, a_2, a_3)$ 可以通过解决目标函数 $R(U)$ 取极小值的非线性最小二乘问题来获得, 即

$$R(U) = \min \left(\sum_{i=1}^{L_2} [y_i - f(x_i, U)]^2 \right), \quad (2)$$

收稿日期: 2023-03-17; **修改日期:** 2023-04-16

作者简介: 闫晓雪 (2000—), 女, 辽宁抚顺人, 辽宁师范大学物理与电子技术学院 2020 级本科生. E-mail: yan_xiaoxue00@163.com

通信作者: 王崇杰 (1964—), 男, 辽宁北镇人, 辽宁师范大学物理与电子技术学院教授, 硕士, 主要研究方向为核技术及其应用. E-mail: wang_chongjie@163.com

其中, y_i 为多道分析器中 x_i 道址上的谱计数, L_1 和 L_2 分别为峰区的左和右边界道址.

将待定参量 U 视为粒子在 D 维空间中的位置坐标, 并将式(2)作为粒子群算法中的适应度函数, 其中 $D=3(N+1)$ 为待定参量的数量. 粒子群算法的基本思想是: 通过按照一定规则不断更新粒子的位置坐标并计算相应的适应度函数值, 搜寻极小适应度函数值所对应的粒子位置坐标, 直到满足循环结束条件为止. 最终的适应度函数极小值所对应的粒子位置坐标即为式(2)的最优解. 为方便计算, 在算法中采用 $U=(u_1, u_2, \dots, u_D)$ 来表示式(1)中的待定参量 U .

算法步骤如下:

1) 在 D 维空间中的一定区间范围内, 对每个粒子的位置 $U_i^k=(u_{i1}^k, u_{i2}^k, \dots, u_{iD}^k)$ 和速度 $V_i^k=(v_{i1}^k, v_{i2}^k, \dots, v_{iD}^k)$ 进行初始化. 设置循环次数初值 $N=0$, 最大循环次数为 N_{\max} , 并分别为每个粒子的最佳适应度变量 $P_{\text{best}}[i]$ 和全局最佳适应度变量 G_{best} 赋予足够大的初始值, 在 Matlab 中, 一般取为常数变量 Inf, 即无穷大, 其中 $i=1, 2, \dots, S$, S 为种群中粒子的数量, 即种群规模.

2) 将粒子的当前位置坐标 $U_i^k=(u_{i1}^k, u_{i2}^k, \dots, u_{iD}^k)$ 代入式(2), 计算每个粒子的适应度 $R_i^k(U_i^k)$.

3) 将每个粒子当前适应度值 $R_i^k(U_i^k)$ 与之前的最佳值 $P_{\text{best}}[i]$ 进行比较. 如果当前适应度值 $< P_{\text{best}}[i]$, 则令 $P_{\text{best}}[i]=$ 当前适应度值, 并且将之前最优位置 $P_i=(p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{iD})$ 更新为当前位置 $U_i^k=(u_{i1}^k, u_{i2}^k, \dots, u_{iD}^k)$.

4) 将每个粒子当前适应度值 $R_i^k(U_i^k)$ 与之前的全局最佳适应度值 G_{best} 进行比较, 若当前适应度值 $< G_{\text{best}}$, 则令 $G_{\text{best}}=$ 当前适应度值, 则全局最优位置 $P_g=(p_{g1}, p_{g2}, \dots, p_{gD})$ 更新为当前位置 $U_i^k=(u_{i1}^k, u_{i2}^k, \dots, u_{iD}^k)$.

5) 根据

$$\begin{cases} v_{id}^{k+1} = \omega v_{id}^k + \eta_1 \text{rand}(0, 1)(p_{id} - u_{id}^k) + \eta_2 \text{rand}(0, 1)(p_{gD} - u_{id}^k), \\ u_{id}^{k+1} = u_{id}^k + v_{id}^k, \end{cases}$$

更新每个粒子的速度和位置, 其中 $d=1, 2, \dots, D; i=1, 2, \dots, S; \omega$ 为惯性因子; η_1 和 η_2 分别为局部和全局学习因子.

6) 循环次数 $N=N+1$, 返回步骤 2), 并重复步骤 2)~6), 直至 $N=N_{\max}$ 结束.

最终的全局最优位置参量 $P_g=(p_{g1}, p_{g2}, \dots, p_{gD})$ 即为式(1)中的待求参量 U .

利用

$$\begin{cases} b_{n1} = p_{g(3n-2)}, \\ b_{n2} = p_{g(3n-1)}, \\ A_n = \sqrt{2\pi} b_{n1} p_{g(3n)}, \end{cases} \quad (3)$$

可以得到式(1)中第 n 个高斯峰的峰高、峰位以及峰面积, 实现 γ 能谱的定性和定量分析.

粒子群算法流程如图 1 所示.

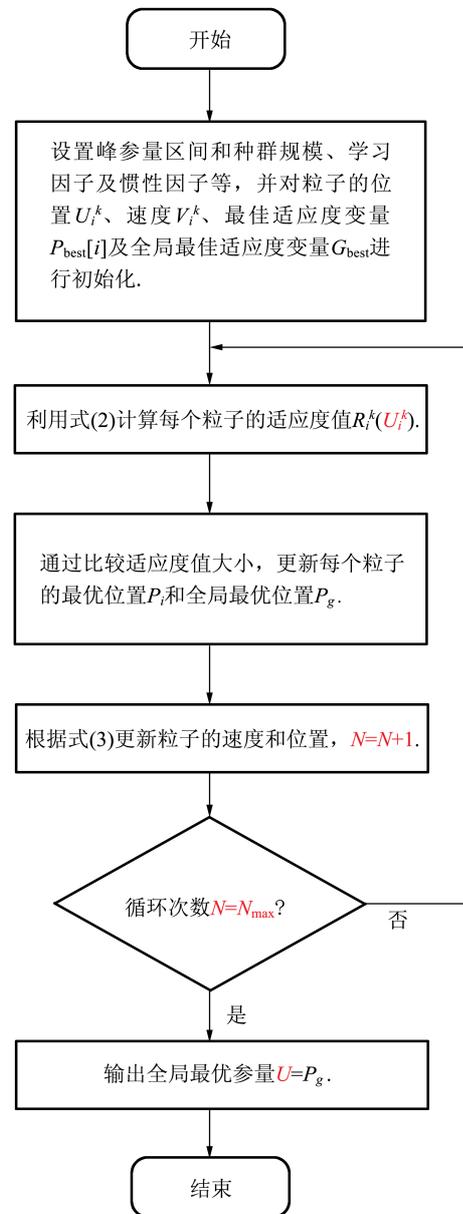


图 1 粒子群算法流程

2 模拟 γ 能谱重叠峰解析

为探究基于粒子群算法的解析能力,对模拟 γ 能谱重叠峰进行了解析,并与传统迭代法进行了对比.

2.1 模拟 γ 能谱重叠峰设计

采用式(1)仿真 γ 能谱的双重峰. 为了与实际测量 HPGe γ 能谱参量基本一致,多道分析器的最大道址取为 8 192,双重峰中 2 个高斯峰的标准差设置为 $b_{13}=b_{23}=4.5$,即相当于峰的半高全宽度为 $N_{FWHM}=10.60$. 初始峰高为 $b_{11}=b_{21}=10^4$,初始峰位分别为 $b_{12}=4\ 800$ 和 $b_{22}=4\ 818$,峰本底参量为 $a_1=10^{-6}$, $a_2=0.05$, $a_3=300$. 通过叠加随机噪声使康普顿平台处的信噪比^[8]约为 21 dB.

通过改变峰高和峰位,分别得到分离度为 0.2, 0.4 和 0.6 情况下,峰高比分别为 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19, 21, 23 和 25 的双重峰 γ 能谱共 39 套. 重叠峰的分离度^[9]. 按

$$C = \frac{|b_{22} - b_{21}|}{2(b_{13} + b_{23})}$$

定义式计算

2.2 模拟重叠峰解析结果

设置 PSO 算法的粒子群规模为 500,最大循环次数 $N_{\max}=200\sim 2\ 000$,学习因子 $\eta_1 = \eta_2 = 2$,惯性因子 $\omega=0.8$.

峰位参量区间取为已知峰位 $\pm \frac{1}{2} N_{FWHM}$,峰高参量区间取为已知峰高 $\pm 20\%$,峰函数标准差参量区间取为 $b_{13}=b_{23} \in [3.5, 5.5]$,峰本底参量区间分别为 $a_1 \in [-0.10, 0.10]$, $a_2 \in [-0.30, 0.30]$ 及 $a_3 \in [200, 350]$. 为了便于比较,传统迭代法的初始参量区间与上述 PSO 法相同,而参量初始值则为区间中间值.

由于 PSO 算法是随机优化算法,因此,对每套谱重复解析了 15 次,计算了 2 个峰面积的平均值以及相对标准差. 将峰面积的平均值作为最佳峰面积,并且计算峰面积的平均值相对理论值的偏差^[10].

图 2 是峰高比为 3.0、分离度为 0.6 的重叠峰解析结果. 由图 2 可看出:PSO 方法拟合谱线与原始谱线吻合较好,重叠峰及峰本底得到了有效分离.

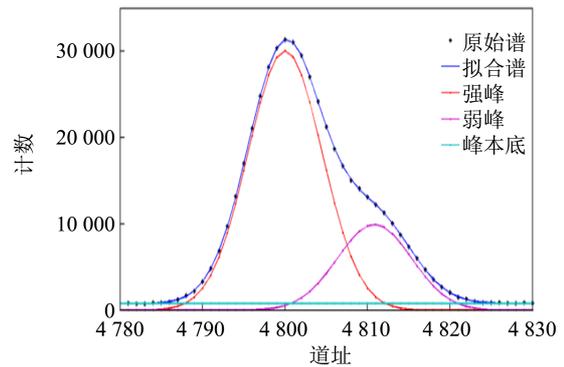
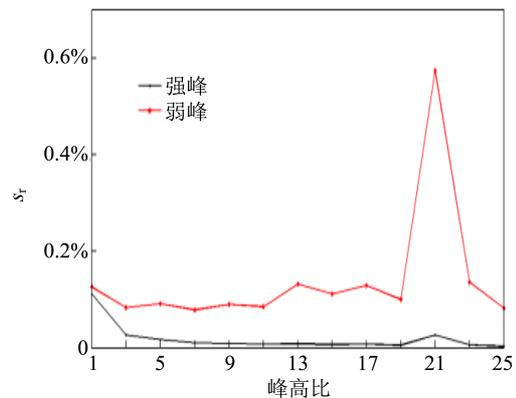
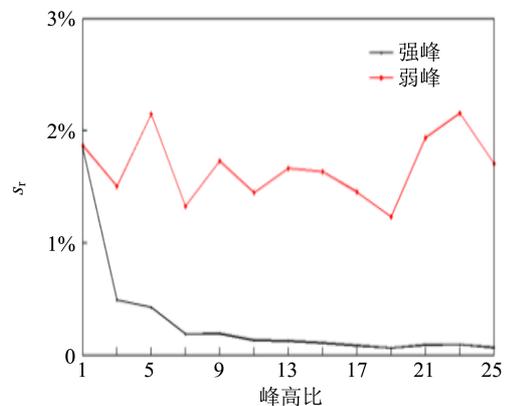


图 2 重叠峰解析示意图

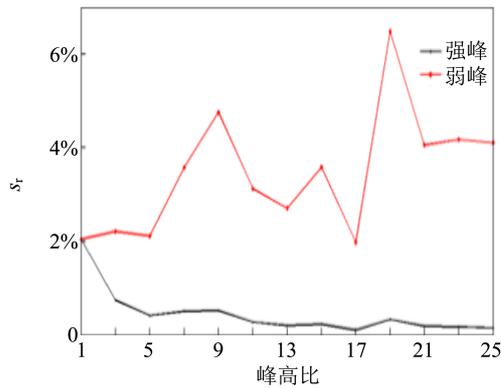
图 3 是不同分离度情况下,峰面积的相对标准差随峰高比的变化. 由图 3 可知,随着分离度的降低,强峰和弱峰面积的相对标准差均增大,特别是弱峰面积相对标准差增大显著,当分离度减小为 0.2 时,最大相对标准偏差接近了 7.0%. 在分离度一定的情况下,强峰面积的相对标准差均小于弱峰,且随着峰高比的增大而逐渐减小,而弱峰面积相对标准差随峰高比的变化规律不明显.



(a) $C=0.6$

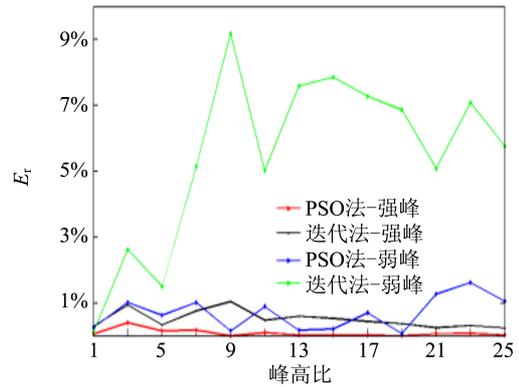


(b) $C=0.4$



(c) $C=0.2$

图 3 不同分离度对应的峰面积的相对标准差



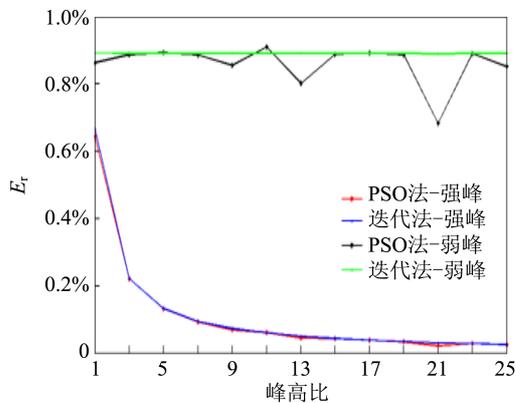
(c) $C=0.2$

图 4 不同分离度对应的峰面积与理论值的相对偏差

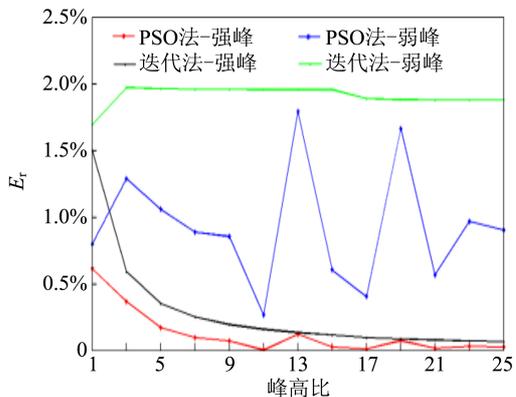
图 4 给出了 PSO 法和传统迭代法的峰面积相对理论值的偏差. 由图 4 可看出: 当分离度为 0.6 时, PSO 法的强峰和弱峰峰面积平均值相对理论值的偏差均较小, 且与传统迭代法几乎相同. 随着分离度降低, PSO 法的峰面积相对偏差均小于传统迭代法. 特别是当分离度为 0.2 时, PSO 法的弱峰峰面积的最大相对偏差为 1.6%, 而传统迭代法达到了 9.2%.

结果表明: 在分离度较大的情况下, PSO 法与传统迭代法的分析精度基本相同; 在分离度较低的情况下, PSO 法获得了较高的分析精度.

为进一步考查初始参量区间大小对解析结果的影响, 在上述研究基础上, 在已知参量值范围内改变峰高、峰位和标准差初始参量区间, 并进行重叠峰解析. 研究表明: 通过增大最大循环次数或粒子群规模, 减小惯性因子等, 在初始参量区间较大的情况下, PSO 法均能较好地收敛于全局最优解, 对初始参量要求较宽松.



(a) $C=0.6$



(b) $C=0.4$

3 实测 γ 能谱重叠峰的解析

为检验解析方法的实用性, 对 ^{152}Eu 标准源和标准环境样品的 HPGGe γ 能谱重叠峰进行解析.

3.1 仪器设备与测量

1) 所用仪器为 EG&G ORTEC 918A HPGGe γ 能谱仪, 探测器相对探测效率为 30%, 谱仪系统在 ^{60}Co 1 332.50 keV 处的能量分辨率为 2.2 keV, 峰康比为 56 : 1.

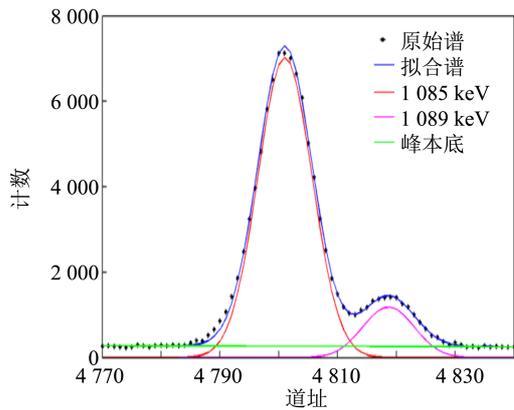
2) 标准源 ^{152}Eu 的放射性活度为 38.78 kBq, 测量活时间设置为 1, 2, 3, 4, 5 h.

3) 标准环境样品 URaThK 由中国计量科学研究院提供, 所含 ^{238}U , ^{226}Ra , ^{232}Th 和 ^{40}K 的放射性活度分别为 411, 379, 638, 2 500 Bq. 标准环境样品和实验室本底的测量活时间分别为 10 h 和 20 h.

3.2 实测 γ 能谱重叠峰解析

3.2.1 ^{152}Eu γ 能谱重叠峰解析

实测 ^{152}Eu HPGGe γ 能谱中 1 085.84 keV 和 1 089.77 keV 重叠峰的解析结果如图 5 所示.

图 5 实测 ^{152}Eu γ 能谱重叠峰解析结果

2 条 γ 射线的分支比分别为 10.13% 和 1.731%，两峰分离度约为 0.96。由于谱仪系统对 2 条 γ 射线的探测效率近似相等，因此 2 条 γ 射线峰面积的比值即为二者分支比的比值，即 5.852。

表 1 给出了 PSO 法和迭代法解析 2 条 γ 射线峰的峰面积比以及与相对理论值的偏差。

表 1 实测 ^{152}Eu 重叠峰的解析结果

t/h	峰面积比		E_r	
	PSO 法	迭代法	PSO 法	迭代法
1	6.322	6.322	8.031%	8.031%
2	6.283	6.283	7.365%	7.365%
3	6.011	6.019	2.712%	2.854%
4	5.894	5.895	0.718%	0.735%
5	5.822	5.854	-0.513%	0.034%

由表 1 可知，由于两峰的分度度相对较大，因此，对于同一谱，PSO 法与传统迭代法的解析精度基本相同，这与模拟谱解析研究的结论一致。而随着测量时间的增大，即谱数据统计涨落的减小，2 种方法的解析精度的一致性也逐渐提高。

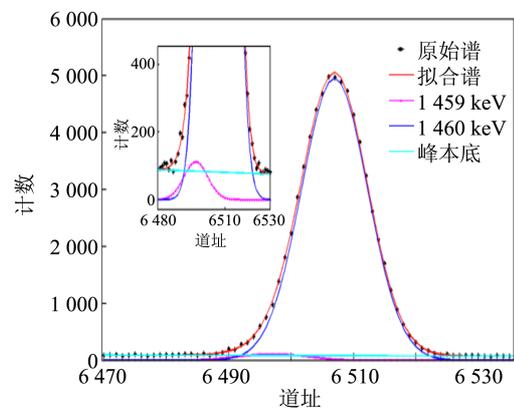
3.2.2 标准环境样品 γ 能谱重叠峰解析

在低水平环境放射性分析中，常用 911.10 keV γ 射线峰来分析 ^{232}Th 的放射性活度^[11]。为更好地检验 PSO 法的解析能力和实用性，利用 ^{232}Th 1459.20 keV γ 射线(分支比为 1.20%)和 ^{40}K 1460.83 keV γ 射线(分支比为 10.67%)重叠峰(分离度约为 0.34)分析了 2 种核素的放射性活度，并与迭代法比较。解析谱图及核素放射性活度相对已知值的偏差分别如表 2 和图 6 所示。由

表 2 和图 6 可看出：尽管 ^{232}Th 1459.20 keV γ 射线峰相对很弱(强、弱峰的峰高比约为 42)，且与 ^{40}K 1460.83 keV γ 射线峰之间的分离度较小，重叠峰仍被有效解析，并获得了较高的分析精度。而传统迭代法对 ^{232}Th 解析结果的相对偏差明显偏大。

表 2 标准环境样品 γ 能谱重叠峰的解析结果

方法	A/Bq		E_r	
	^{232}Th	^{40}K	^{232}Th	^{40}K
PSO 法	609.4	2281.1	-4.5%	-8.8%
迭代法	366.9	2310.4	-42.5%	-7.6%

图 6 混合标准源 γ 能谱重叠峰的解析结果

实测谱重叠峰解析结果表明：PSO 法是实用并且有效的，与传统迭代法相比，具有更强的解析能力。

4 讨论与结论

研究表明：在重叠峰分离度较大的情况下，PSO 法与传统迭代法的解析精度基本相同。而在分离度较低，且峰高比较大，传统迭代法难以得到精确解的情况下，PSO 法亦能获得较高的解析精度，具有更强的解析重叠峰能力。

由于 PSO 算法属于随机算法，因此，取多次解析结果的平均值更为合理。在初始峰参量区间范围较大的情况下，PSO 法亦能收敛于全局最优解。而逐步减小初始峰参量区间、适当减小惯性因子、增加最大循环次数和粒子群规模等方式，则有助于提高方法的解析精度。

总之，基于 PSO 算法的 γ 能谱重叠峰解析方法克服了传统迭代法易于陷入局域最优的缺点，算法简单易于实现，参量少，对初始峰参量要求宽

松,且对低分离度重叠峰具有更强的解析能力,是有效的 γ 能谱重叠峰解析方法.

参考文献:

- [1] 田东风,龚健,伍钧,等. 核材料 γ 特征谱的探测和分析技术[M]. 北京:国防工业出版社,2005:44-89.
- [2] 郑碧华,陈劲民,熊正焯. γ 能谱测量及其应用[J]. 中山大学学报(自然科学版),2005,44(S1):158-160.
- [3] 姜文华,涂彧,万骏. γ 能谱测量方法在环境放射性水平监测中的应用[J]. 中国辐射卫生,2007,16(4):504-506.
- [4] Eke C. Investigation of some properties of chemical fertilizers using gamma-ray spectrometry and energy dispersive X-ray fluorescence spectrometry [J]. Instruments and Experimental Techniques, 2022, 65(3):482-490.
- [5] 胡耀垓,张晓星,赵正予,等. 光谱重叠峰的曲线拟合解析策略与实现[J]. 重庆大学学报,2012,35(5):76-82.
- [6] 袁红志,游开明,谭延亮. 非线性数据拟合对重叠峰信号的分离[J]. 衡阳师范学院学报,2013,34(3):37-39.
- [7] Kenney J, Eberhart R. Particle swarm optimization [C]//Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks. Perth, 1995:1942-1948.
- [8] 胡广书. 数字信号处理:理论、算法与实现[M]. 北京:清华大学出版社,2001:5-99.
- [9] 周世融,何剑锋,任印权,等. X射线荧光光谱中低分离度重叠峰分解的方法研究[J]. 光谱学与光谱分析,2020,40(4):1221-1226.
- [10] 李莉. 统计学原理与应用[M]. 南京:南京大学出版社,2019:14-58.
- [11] 王崇杰,张爱莲. 消除 γ 能谱中 ^{232}Th 对 ^{40}K 的干扰[J]. 核技术,2003,26(11):831-833.

Decomposing the overlapping peaks in γ spectrum based on particle swarm algorithm

YAN Xiaoxue, WANG Chongjie

(School of Physics and Electronic Technology, Liaoning Normal University, Dalian 116029, China)

Abstract: To overcome the disadvantages such as requiring strict initial parameters, easily falling into the local optimum, of the iterative algorithm used in the traditional γ spectrum analysis, a particle swarm algorithm based the method for decomposing the overlapping peaks of γ spectrum was proposed, and the basic principle and corresponding algorithm were given. The results of decomposing the overlapping peaks for the simulated and measured γ spectra showed that the method could achieve high analytical accuracy even under the situation of the low separation degree of overlapping peaks, while having strong decomposing ability. Meanwhile, the algorithm has the advantages of fewer parameters, relaxed requirements on initial parameters, and easy implementation. And converging to the global optimal solution made it an effective method for decomposing the overlapping peaks in γ spectrum.

Key words: γ spectrum analysis; overlapping peaks; particle swarm algorithm; least squares method; iterative algorithm

[责任编辑:任德香]