# Спектрометрия с божьей помощью
# (новый подход к обработке сцинтилляционных гамма спектров)

**Дрёмин Геннадий Иванович, инженер, индивидуальный предприниматель**

*Критика подхода к обработке сцинтилляционных спектров предлагаемая разработчиками из национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» - НИЯУ МИФИ.*

Гамма спектрометрия, сцинтилляционные гамма спектры

Прочитал недавно в Интернете интересную статью уважаемых учёных из уважаемого института:
В.В. Дровников, М.В. Егоров, Н.Ю. Егоров, В.М. Живун, А.В. Кадушкин, В.В. Коваленко
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» - НИЯУ МИФИ.
Лаборатория «Ядерно-физические технологии радиационного контроля» - НИЛ ЯФТРК.
«Программа «Na Spectra Analysis System» - SAS Na M3 для обработки сложных сцинтилляционных спектров»
(http://www.radiation.ru/publications/SAS_Na_M3_software_for_complex_NaI_gammaspectra.pdf)

Удивила меня статья. Солидный институт (я сам выпускник МИФИ 1973 года). С некоторыми авторами знаком. А используемая ими математика меня весьма озадачила.

Вот отрывок из статьи:
«*Обычно для обработки сцинтилляционных спектров применяют метод пиков или матричный метод. К сожалению, практический опыт использования реализующих эти методы коммерчески доступных программ, показал их малую пригодность для обработки спектров гамма-излучения упомянутого выше класса образцов. Такой результат обусловлен относительно низким энергетическим разрешением используемых NaI или CsI сцинтилляционных гамма-спектрометров, наличием в обрабатываемых спектрах близко расположенных пиков разных радионуклидов и несовершенством самих методов. Иногда дополнительным мешающим фактором является плохая статистика обрабатываемого спектра, обусловленная малым временем измерения спектра, которое ограничено производственными условиями.*

*В связи с этим, специалистами НИЛ ЯФТРК и Новоронежской АЭС были проведены оценки возможности использования разработанного в НИЛ ЯФТРК модифицированного матричного метода для корректной обработки таких спектров, в частности для оперативного радионуклидного анализа допустимых сбросов и выбросов НВ АЭС [1, 2].*
*Обычный матричный метод обработки спектров состоит в решении системы линейных уравнений*
$$A[i]=\sum_j Q\,j * Bj\,[i],\ (1)$$
*где $A[i]$ –измеренный спектр,*
*$Bj\,[i]$ – спектры стандартов, образующие матрицу отклика,*
*$Q\,j$ – активности радионуклидов в измеряемом образце.*
*Значения активностей $Q\,j$ и их погрешностей определяются методом наименьших квадратов путем минимизации квадратичного функционала R:*

$R=\sum_i (A[i] - \sum_j Q j *Bj [i])^2 * W[i]$ *(2)*

*где W[i] –весовые множители, равные обратной величине квадрата погрешности значений A[i].*
*Основная проблема матричного метода – это плохая обусловленность системы (1), приводящая к усилению статистических флуктуаций данных и, следовательно, к большим погрешностям оценок Q j.*
*Суть использованной модификации матричного метода состоит в применении к обеим сторонам уравнения (1) некоторого линейного оператора L, такого, что новая система уравнений*
$L(A[i]) = \sum_j Q j *L(Bj [i]),$ *(3)*

*имеет то же решение, что и (1), но лучше обусловлена и поэтому существенно менее чувствительна к статистическим флуктуациям данных.»*

Перепишем формулы авторов в более привычном для операторных методов виде:

$B \cdot q = a$ (1a)
$r = (W \cdot (B \cdot q - a))^T \cdot (W \cdot (B \cdot q - a))$ (2a)
$L(a) = L(B) \cdot q$ (3a)
Большими буквами обозначаем операторы и матрицы, маленькими – вектора.
Поскольку, как пишут авторы, оператор *L* линеен, формулу (3a) можно записать в виде
$L \cdot a = L \cdot B \cdot q$ (3b)

В начале 20 века русский математик Андрей Андреевич Марков доказал теорему, что в случае линейной модели (наша модель $B \cdot q$ - линейна), при условии, что ковариационная матрица объекта (наш объект – вектор *a*) имеет диагональный характер (нет корреляции), и все диагональные элементы ковариационной матрицы равны (равная точность уравнений) метод наименьших квадратов даёт наиболее эффективные (то есть имеющие минимальные дисперсии) и несмещённые оценки (Best Linear Unbiased Estimators). Из этого следует, что если ковариационная матрица вектора объекта имеет другой характер, есть один единственный линейный оператор *W*, применение которого к нашей линейной системе приводит ковариационную матрицу объекта (объект - вектор *a*) к единичной матрице (то, что нам требуется для выполнения условий теоремы). Теорему назвали теоремой Гаусса-Маркова, поскольку метод наименьших квадратов изобрёл Гаусс.

Поскольку вектор *a* является измеренным спектром без всякой предварительной обработки, ковариационная матрица вектора *a (*назовём её $K_a$*)* диагональна, и диагональными членами матрицы являются дисперсии отсчётов в каналах спектра. Оператором *W* будет такой оператор, для которого выполняется условие $W^T \cdot W = K_a^{-1}$.В нашем случае его матрица также диагональна и $W[i][i] = 1/\sqrt{K_a[i][i]}$.

Заметим, что ковариационная матрица вектора *L·a:* $K_{La} = L \cdot K_a \cdot L^T$навряд ли будет диагональной - для этого матрица линейного оператора *L* должна быть диагональной, а зачем нам такой оператор, который, кроме того, что изменит веса уравнений, ничего не даст (обусловленность не увеличит).

В этом случае (после применения к нашей системе линейного оператора *L*) формула (2), которая в обычном варианте обеспечивает выполнение требований теоремы Гаусса-Маркова, уже не годится, а работает формула (2a). И чтобы выполнить условия теоремы нам надо использовать такой оператор $W_{La}$, который нашу ковариационную матрицу $K_{La}$ превратит в единичную. И этим оператором будет $W_{La} = W \cdot L^{-1}$, который отменит действие оператора $L$: $W \cdot L^{-1} \cdot L \cdot a = W \cdot a$; $W \cdot L^{-1} \cdot L \cdot B \cdot q = W \cdot B \cdot q$

Существуют линейные операторы, уменьшающие флуктуации спектра (наш вектор $a$ – спектр) – операторы, сглаживающие спектр. Но при сглаживании обусловленность системы уменьшается. Есть наоборот – операторы, увеличивающие обусловленность системы, но при этом флуктуации увеличиваются. Все эти операторы делают значения координат вектора объекта коррелированными. И все они в нашем случае бессмысленны. «Увеличение эффективности оценок» мы увидим только в том случае, если будем не корректно считать неопределённости наших оценок.

Но может быть, я чего не понимаю. Возможно, Марков Андрей Андреевич неправ. Его же в 1912 году отлучили от православной церкви. И что он мог доказать без божьей помощи? А в МИФИ, наоборот, в 2012 открыли кафедру теологии, и МИФИ очень сблизился с Русской Православной Церковью Московского патриархата. А с божьей помощью всё возможно – и дважды два не обязательно четыре, а вполне быть может пять, или шесть, и даже – семь или восемь!

23.07.2023