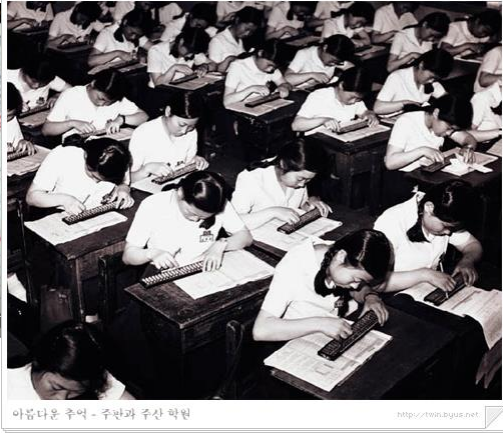
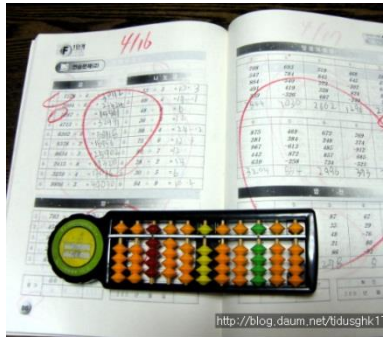


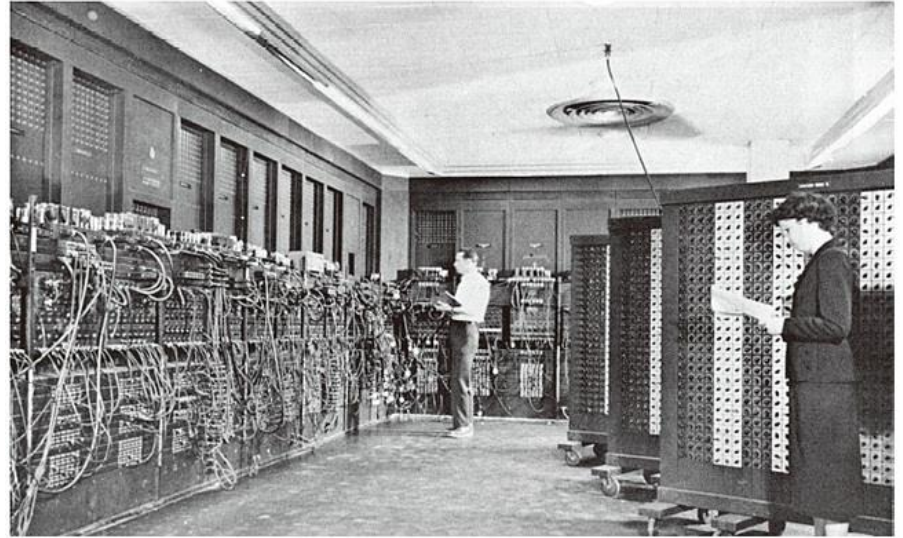
III. 감마선 스펙트럼 데이터의 해석

1. 서론

데이터의 해석수단의 발전



아침나온 추억 - 주연과 주산 학원

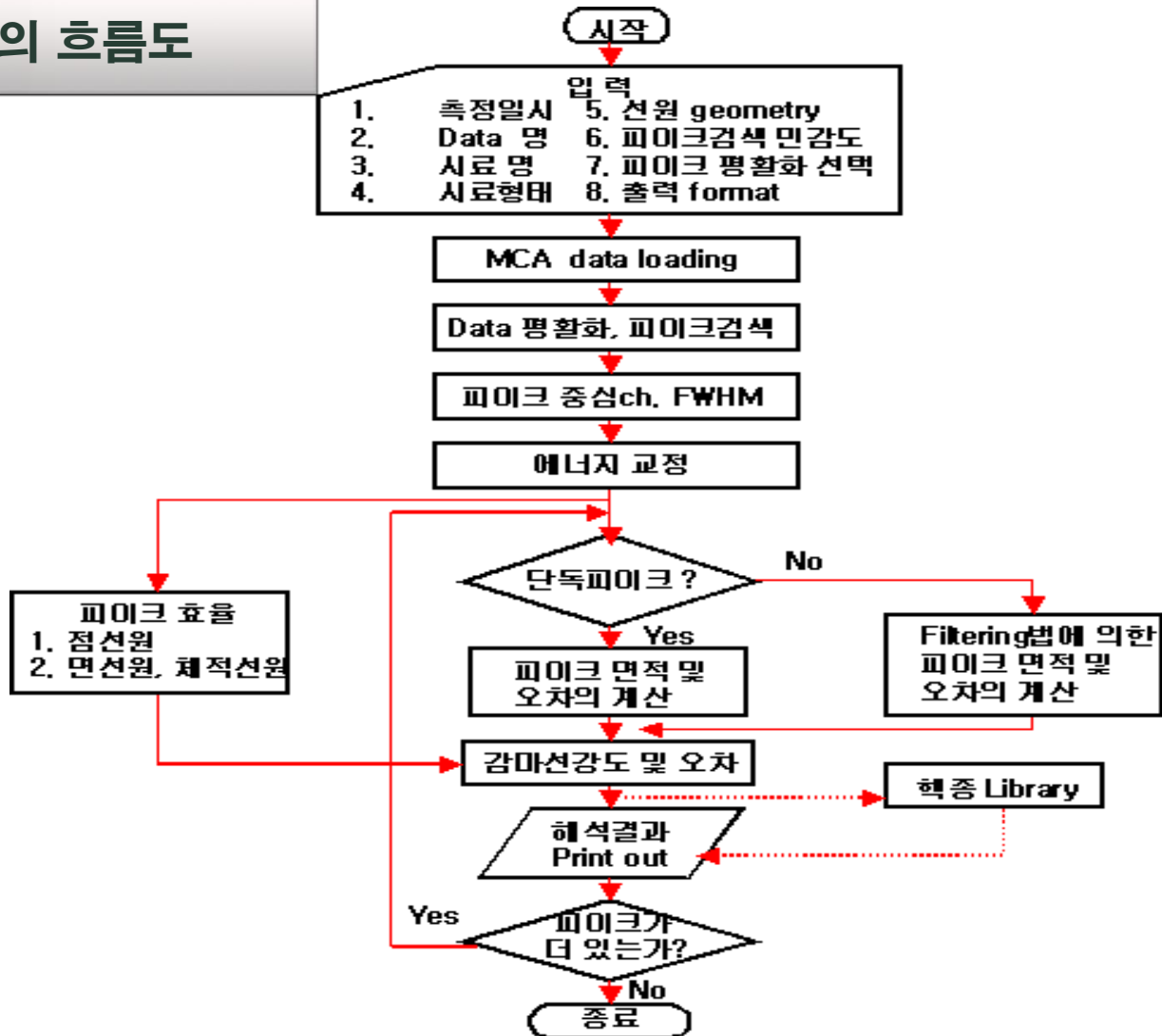


1948년에 개발된 현대 컴퓨터의 시조 에니악(ENIAC), 19,000여 개의 진공관으로 구성되어 있으며 무게가 30톤을 넘는다. U.S. Army Photo



1. 서론

데이터의 해석의 흐름도

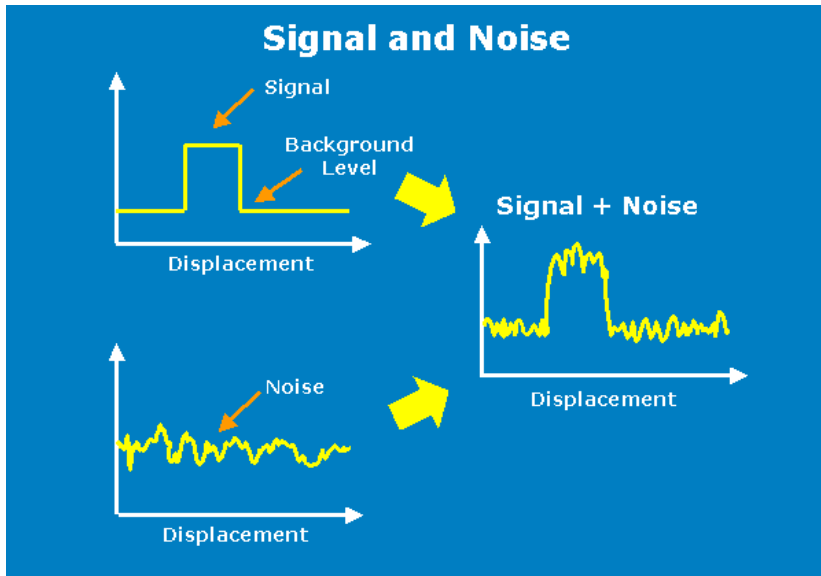


2. 스펙트럼 평활화

(1) 스펙트럼 평활화(spectrum smoothing)

스펙트럼 평활화는 제1단계 S/N비의 개선

전기신호와의 비교



전기신호	스펙트럼
신호 성분(signal)	피크 (peak)
DC 성분	백그라운드 (Baseline)
잡음 성분(noise)	통계적 요동
능동적 처리 (filter 회로)	수동적 연산처리 (수치 filter)

2. 스펙트럼 평활화

(2) 수치필터를 이용한 연산처리

- ◆ 통계적 잡음제거 방법으로서 가장 간단하게는 특정채널을 포함한 좌우 구간내에서 평균값을 구하는 방법 (단순이동평균 : 산술평균을 의미)

➤ Spectrum Convolution

$$\bar{n}(i) = \frac{1}{N_m} \sum_{k=-m}^m C_k \cdot n(i+k)$$

➤ Statistic fluctuation

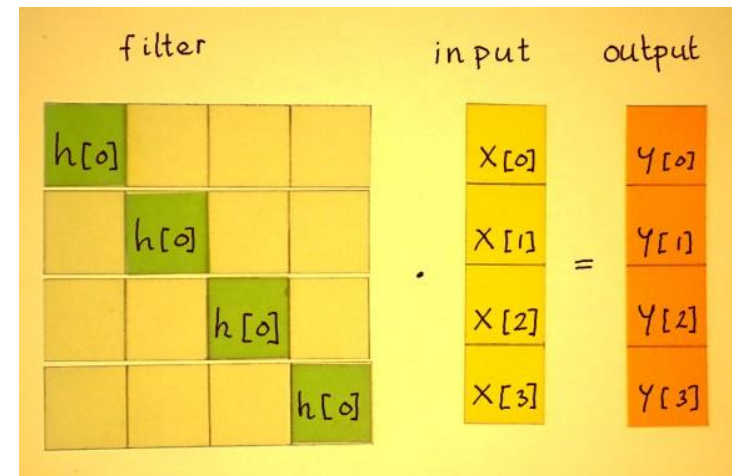
$$\bar{\sigma}(i) = \frac{1}{N_m} \sqrt{\sum_{k=-m}^m C_k^2 \cdot n(i+k)}$$

C_k ; Filter 함수(스펙트럼해석에서는 Convolution 계수를 말함)

N_m ; 규격화 상수

단순 이동평균($C_k=1$), 가중치 이동평균(C_k 에 weighting을 둔 것)

Convolution ; 어떤 함수가 있을 때 그 함수로 수렴하는 매끄러운(smooth) 함수를 찾는 수학적 기법
영상의 smoothing과 sharpening과 같은 효과를 위해 사용하기도 함



2. 스펙트럼 평활화

(3) 피크가 백그라운드(baseline)에 비해서 훨씬 큰 경우

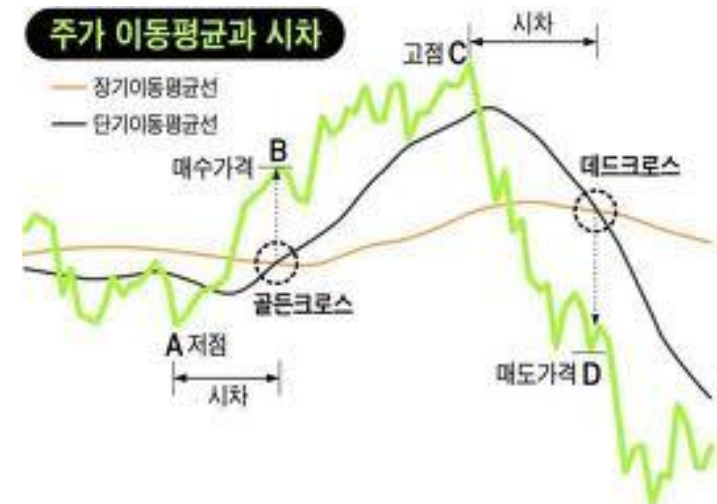
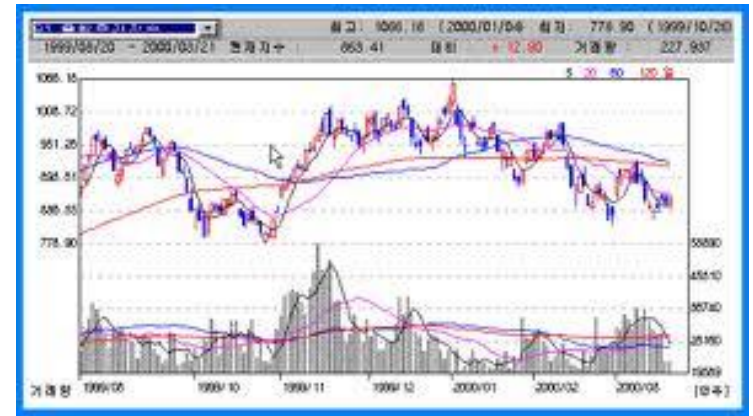
$$\bar{\sigma}(i) \doteq \Delta_m \sqrt{n(i)}$$

■ 예 : 단순이동평균($C_k=1$)

✓ $m=1(3\text{점}), N_m=3, \Delta_m=0.58$

✓ $m=2(5\text{점}), N_m=5, \Delta_m=0.45$

- 단순 이동평균의 경우 피크의 퍼짐을 크게 하기 때문에 가중치 이동평균을 사용
- m 은 S/N 비의 개선(장점)과 반치폭 저하(단점)을 상호 고려하여 결정
- 필터함수의 반치폭의 결정 => 대략 피크 반치폭의 1 ~ 1.5배 정도



2. 스펙트럼 평활화

(4) 스펙트럼 평활화의 예제

구분	2m+1	N _m	C ₀	C ₁ , C ₋₁	C ₂ , C ₋₂	C ₃ , C ₋₃	C ₄ , C ₋₄	Δm
다항식에 의한 최소자승법 (Savitzky)	5	35	17	12	-3	-	-	0.698
	7	21	7	6	3	-2	-	0.577
	9	231	59	54	39	14	-21	0.505
Gauss 함수	5	1	0.403	0.244	0.0545	-	-	0.536
	7	1	0.283	0.221	0.106	0.031	-	0.450
	9	1	0.204	0.180	0.124	0.0665	0.028	0.384

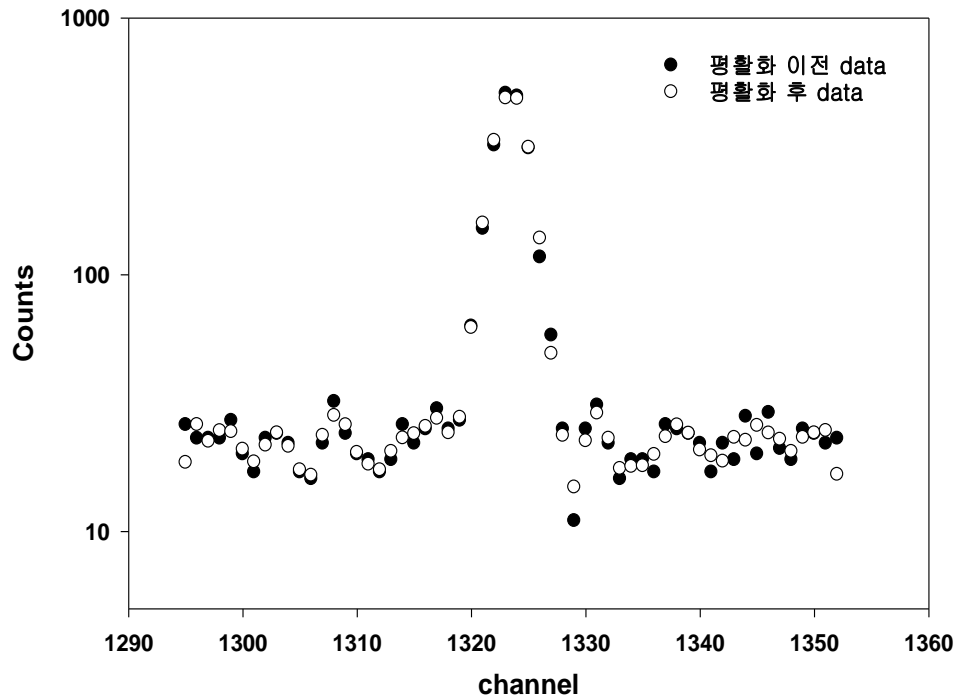
5점 구간에 대해서 다항식 최소자승법 필터 이용

$$\overline{n(i)} = \frac{1}{35} [-3\{n(i-2) + n(i+2)\} + 12\{n(i-1) + n(i+1)\} + 17n(i)]$$

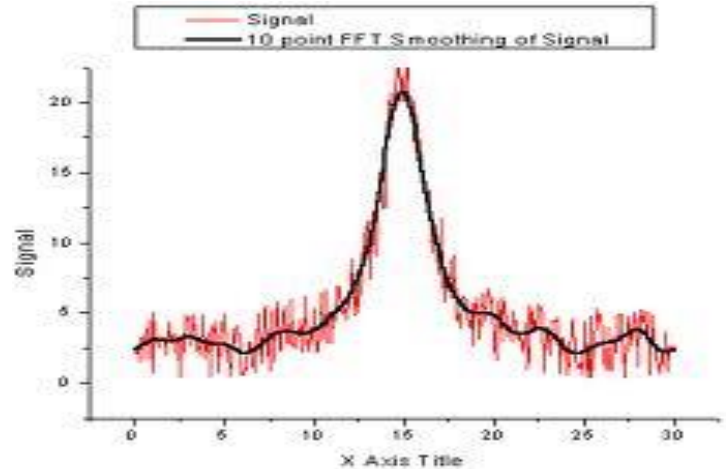
$$\overline{\sigma(i)} = \frac{1}{35} \sqrt{[9\{n(i-2) + n(i+2)\} + 144\{n(i-1) + n(i+1)\} + 289n(i)]}$$

2. 스펙트럼 평활화

(4) 평활화 처리를 한 스펙트럼의 예

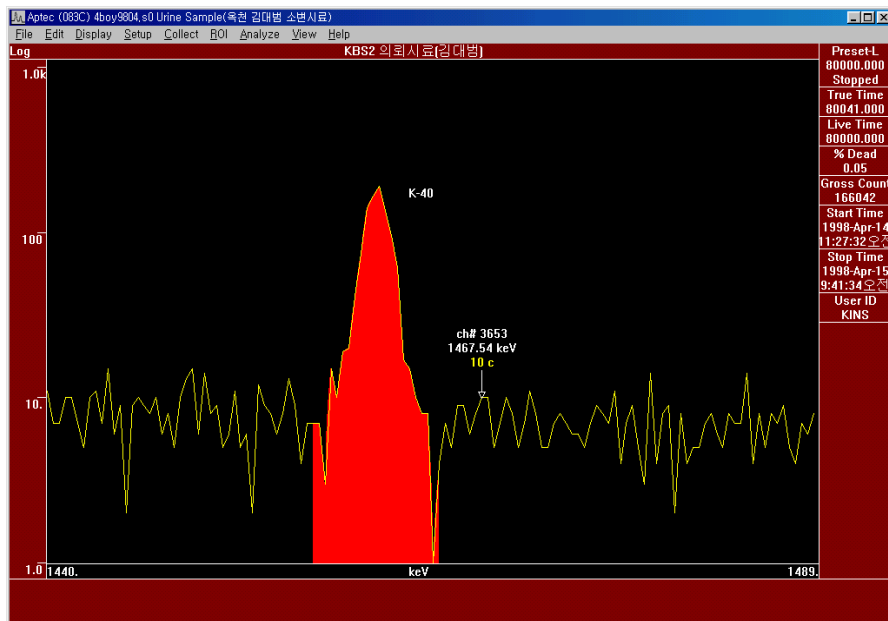
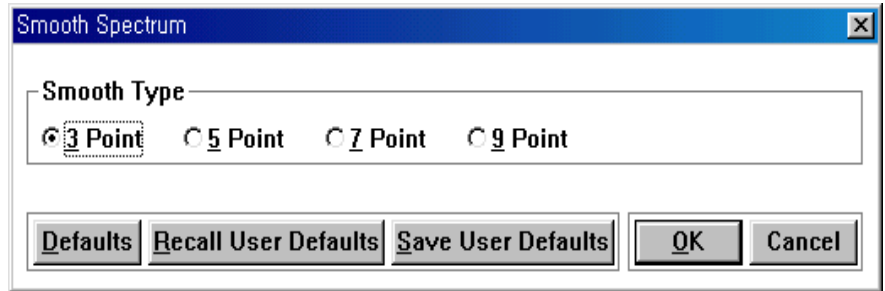


채널 (i)	계수치 n(i)
1295	26, 23, 23, 23, 27, 20, 17, 23, 24, 22,
1305	17, 16, 22, 32, 24, 20, 19, 17, 19, 26,
1315	22, 25, 30, 25, 27, 63, 151, 319, 508, 496,
1325	311, 117, 58, 25, 11, 25, 31, 22, 16, 19,
1335	19, 17, 26, 25, 24, 22, 17, 22, 19, 28,
1345	20, 29, 21, 19, 25, 24, 22, 23

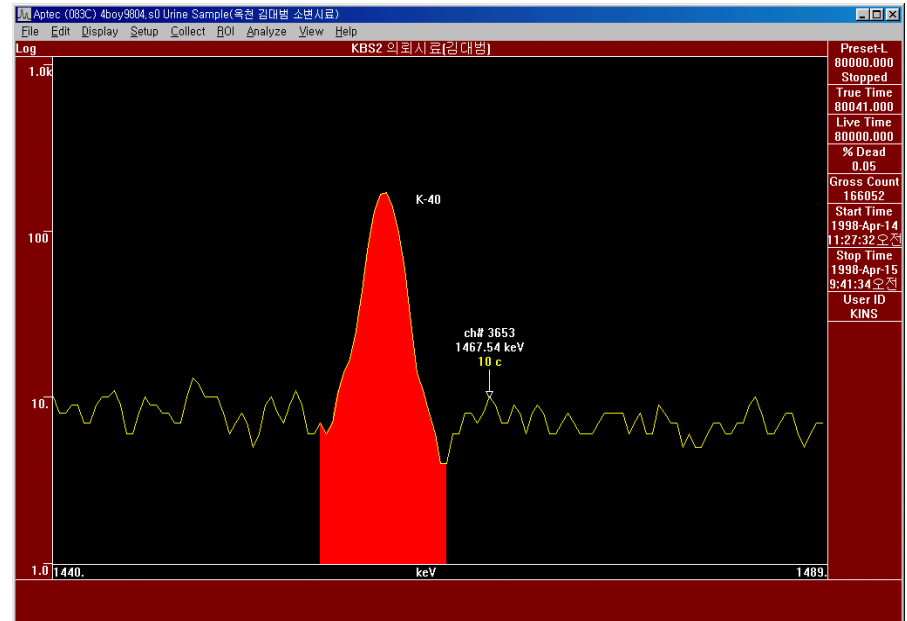


2. 스펙트럼 평활화

(5) 실제 감마선 스펙트럼의 예



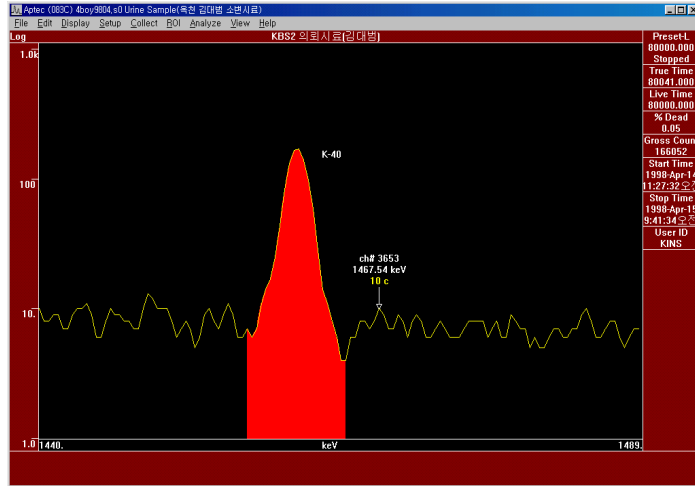
원 스펙트럼(평활화 이전)



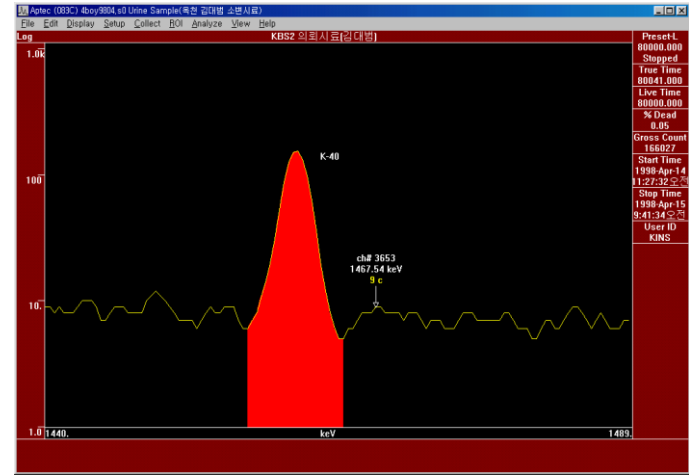
smoothing 스펙트럼(3점 구간)

2. 스펙트럼 평활화

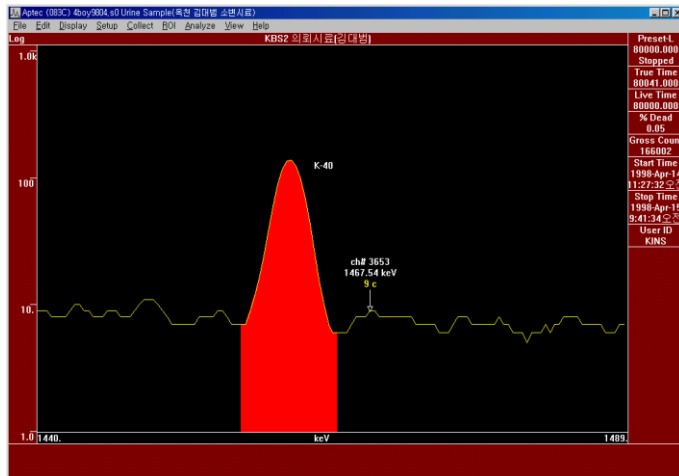
◆ 스펙트럼 평활화 [예]



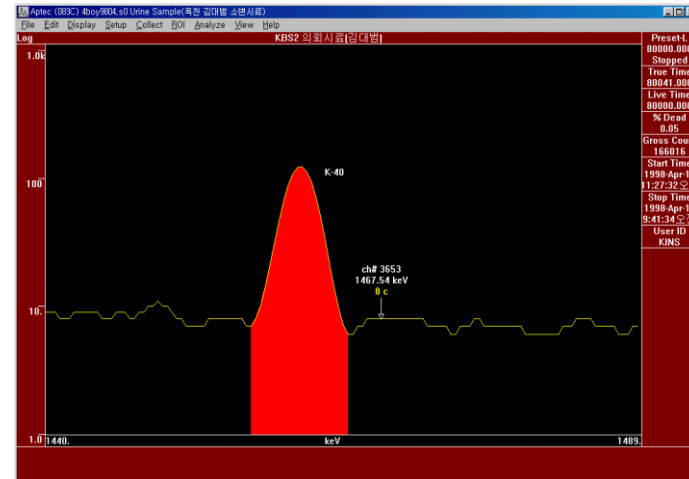
3점 구간



5점 구간



7점 구간



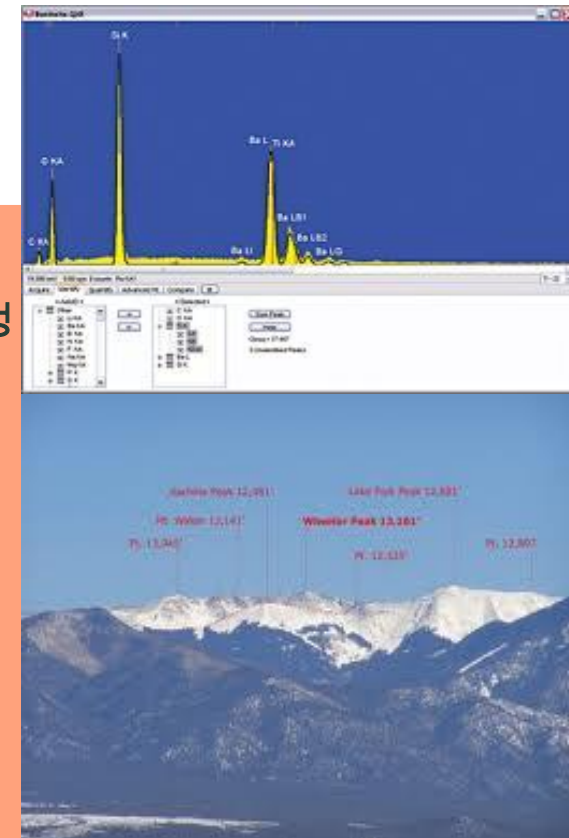
9점 구간

3. 피크 검색(식별)

(1) 피크의 검색 및 판별 방법

피크 검색은 스펙트럼의 미분조작(derivative)을 통한 판별
(피크 평활화는 일종의 적분 조작(convolution))

- 피크 판별방법(인간의 눈으로 판별하는 원리와 사실은 동일)
 - ✓ 판별의 기준을 설정 → 이것과 비교해서 유의 정도에 따라 결정
- 다양한 계산방법이 존재 (대표적인 방법으로는)
 - ✓ 백그라운드(Baseline)는 어떤 제한된 채널범위에서 거의 직선
 - ✓ 따라서 1차 미분 또는 2차 미분을 하면 피크가 제거
 - ✓ 그러나 통계적 요동이 큰 스펙트럼을 그대로 미분하면 요동이 더욱 커지므로 평활화를 포함한 방법이 이용
- 이차미분방법



3. 피크 검색(식별)

(2) 피크의 검색을 위한 2차미분 방법

➤ Second derivative of the spectrum

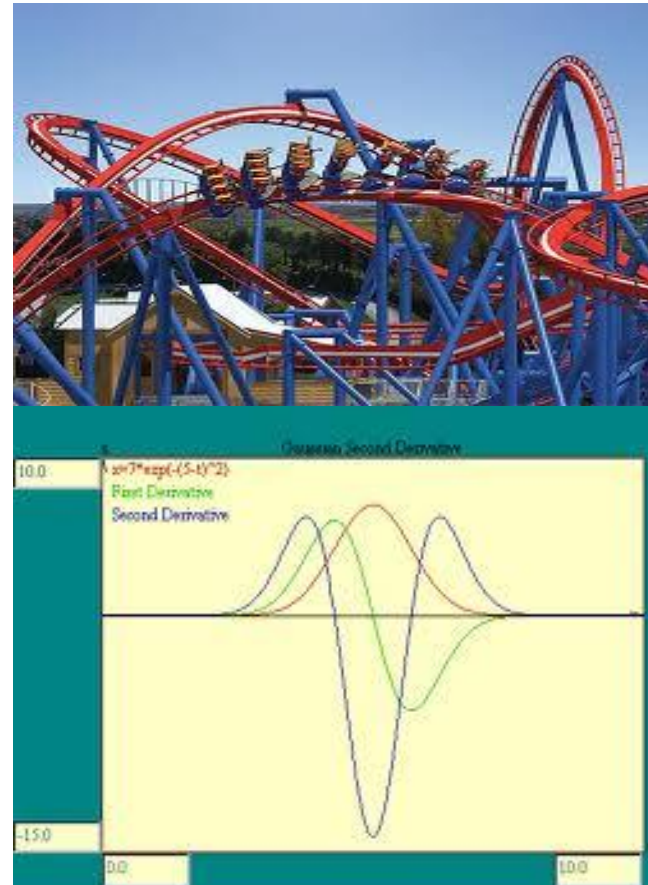
$$n''(i) = \sum_{j=-k}^k A_j n(i+j) \quad \text{여기서} \quad \sum_{j=-k}^k A_j = 0$$

➤ Statistic fluctuation

$$\sigma_i'' = \sqrt{\sum_{j=-k}^k A_j^2 \cdot n(i+j)}$$

Note :

- ✓ A_j 는 스펙트럼의 통계적 요동, 피크의 반치폭, 중첩피크에 대한 분해능 등을 고려 결정
- ✓ A_j 는 2차 미분다항식 최소자승법 필터 또는 Gauss 함수 2차 미분형을 이용



3. 피크 검색(식별)

(3) 2차미분 방법을 이용한 피크판별 절차

피크 판별 : $n''(i)$ 와 σ_i'' 의 크기 비교를 통해서 수행

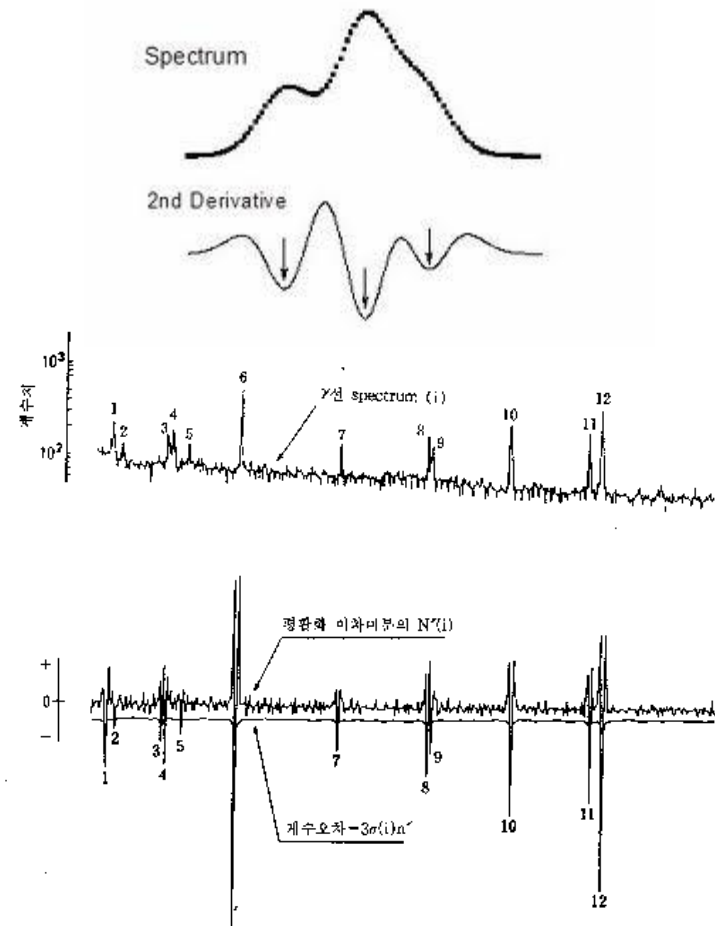
(1) $|n''(i)| > s \cdot \sigma_i''$ 가 되는 조건을 만족해야 한다

- s 는 피크 검색의 민감도(sensitivity)를 주는 상수 값으로서 2~3
- s 가 작으면 대단히 작은 피크 까지도 판별이 가능
- 반면에 통계적 요동에 따라 본래 피크가 아닌 것도 피크인 것처럼 판별할 가능성이 있음

(2) 상기의 조건을 만족을 하면 곧 바로 $n''(i)$ 가 최대가 되는 i 를 구한다,

- 즉 $|n''(i)| > |n''(i-1)|$ 가 될 때에는 i 를 1로 두고
- $|n''(i)|$ 가 감소로 돌아서면 다음 (3)으로 간다.

(3) 피크 중심의 정확한 값을 구한다.



3. 피크 검색(식별)

(4) 9점 구간에 대해서 Gauss함수 2차 미분형 필터 이용

구분	2k+1	A ₀	A ₁ , A ₋₁	A ₂ , A ₋₂	A ₃ , A ₋₃	A ₄ , A ₋₄	A ₅ , A ₋₅	A ₆ , A ₋₆
Gauss 함수 이차미분법	7	-10	-1	5	1	-	-	-
	9	-10	-3	4	3	1	-	-
	13	-8	-5	-1	4	3	2	1
다항식에 의한 최소자승법 (Savitzky)	7	-4	-3	0	5	-	-	-
	9	-20	-17	-8	7	28	-	-
	13	-14	-13	-10	-5	2	11	22

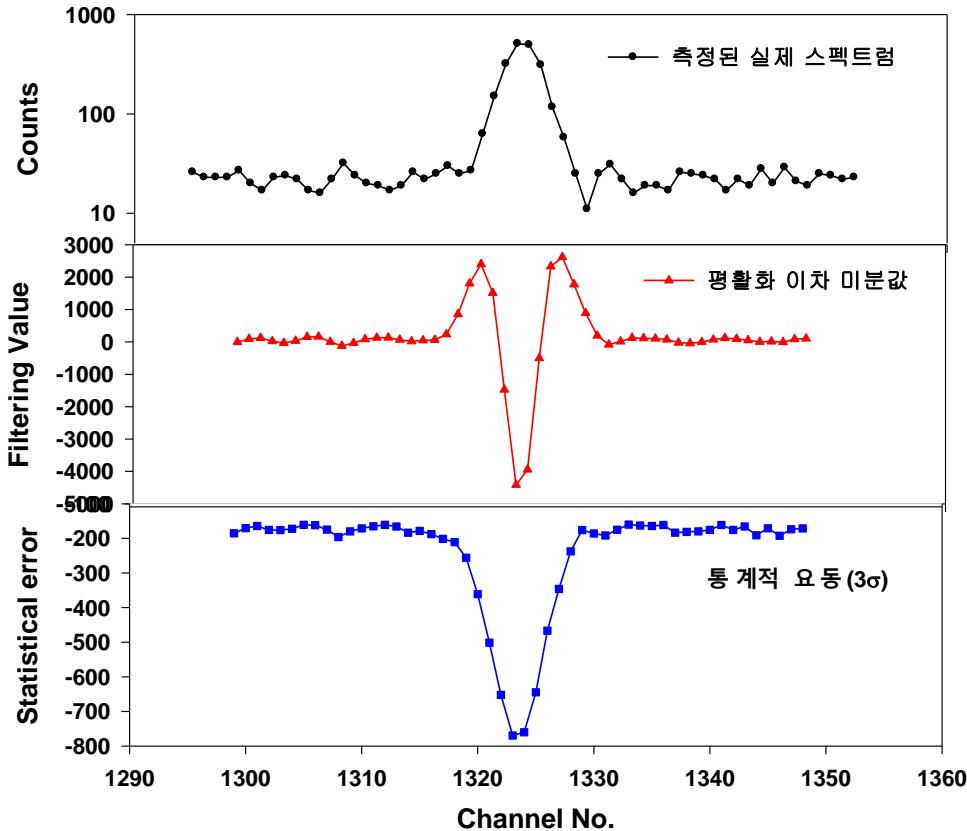
$$n''(i) = -10n(i) - 3[n(i+1) + n(i-1)] + 4[n(i+2) + n(i-2)] \\ + 3[n(i+3) + n(i-3)] + [n(i+4) + n(i-4)]$$

$$\sigma''(i) = \sqrt{100n(i) + 9[n(i+1) + n(i-1)] + [n(i+3) + n(i-3)] \\ + 16[n(i+2) + n(i-2)] + [n(i+4) + n(i-4)]}$$

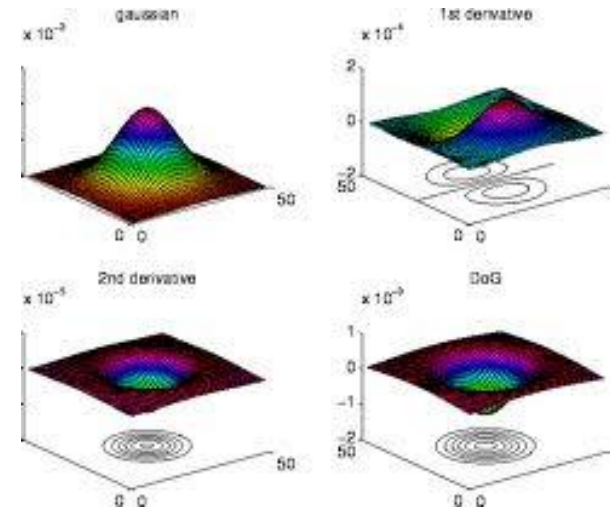
$$n''(i) < s \bullet \sigma_i'' \quad \text{가 만족할 때 } i \text{ 채널은 피크 라고 판정}$$

3. 피크 검색(식별)

(5) Gauss함수 2차 미분형 필터를 이용한 피크검색의 예

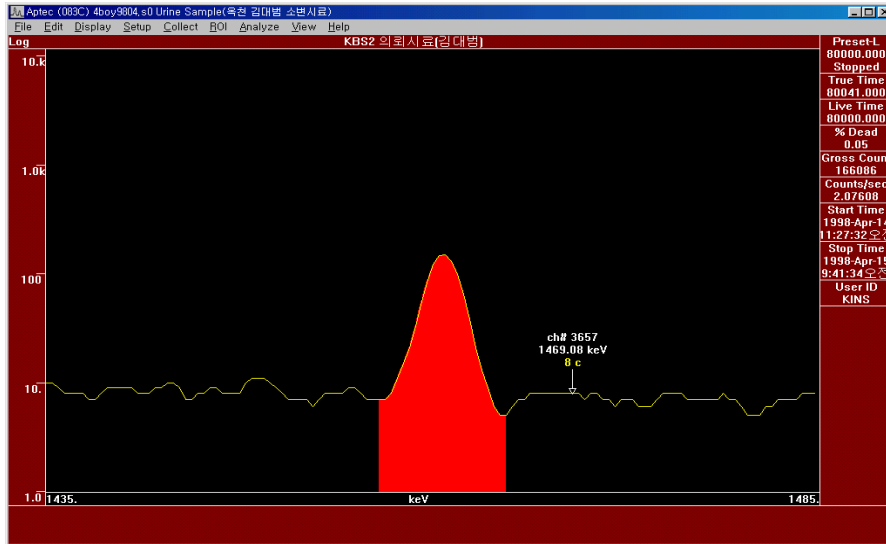


채널 (i)	계수치 n(i)
1295	26, 23, 23, 23, 27, 20, 17, 23, 24, 22,
1305	17, 16, 22, 32, 24, 20, 19, 17, 19, 26,
1315	22, 25, 30, 25, 27, 63, 151, 319, 508, 496,
1325	311, 117, 58, 25, 11, 25, 31, 22, 16, 19,
1335	19, 17, 26, 25, 24, 22, 17, 22, 19, 28,
1345	20, 29, 21, 19, 25, 24, 22, 23

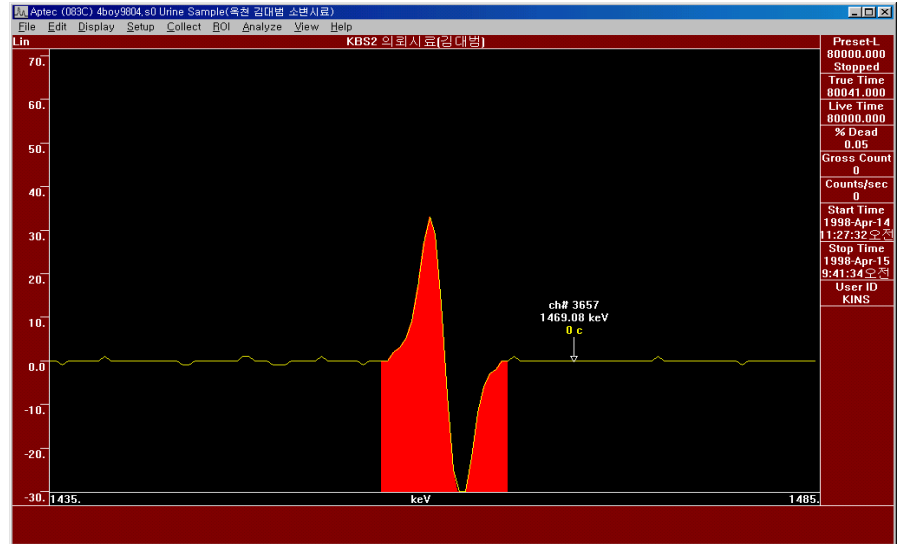


3. 피크 검색(식별)

(6) 피크 검색의 실제 예(1차 미분)



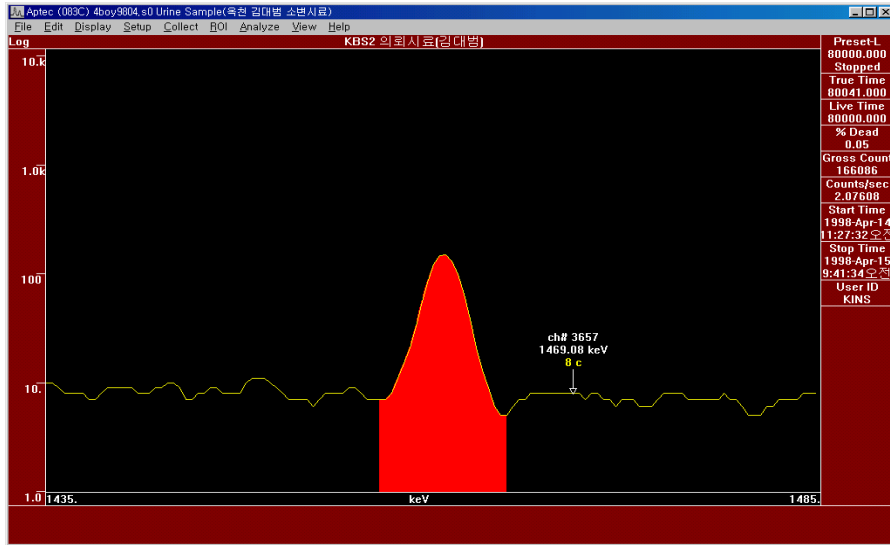
smoothing 스펙트럼(9점 구간)



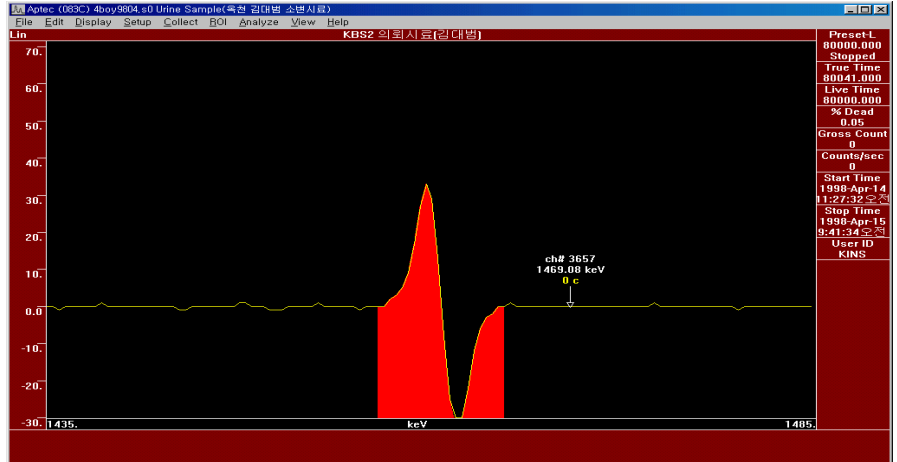
1차 미분한 스펙트럼(9점 구간)

3. 피크 검색(식별)

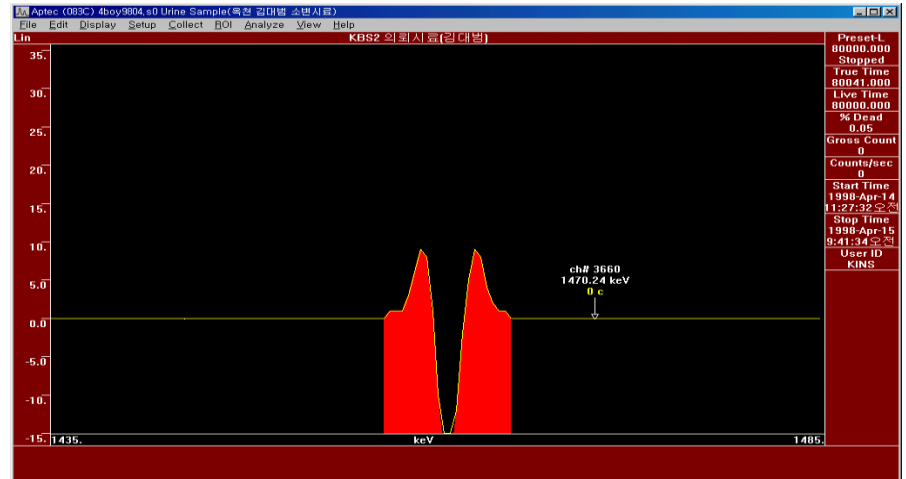
(6) 피크 검색의 실제 예(2차 미분)



smoothing 스펙트럼(9점 구간)



1차 미분한 스펙트럼(9점 구간)



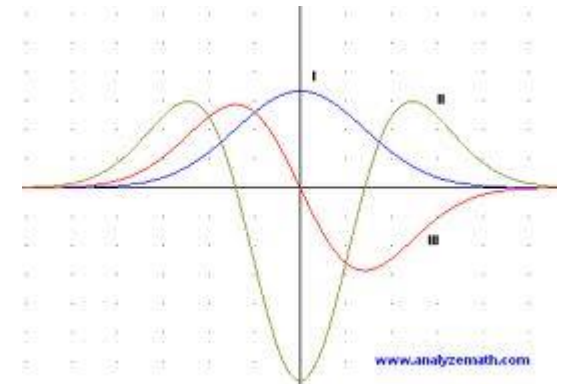
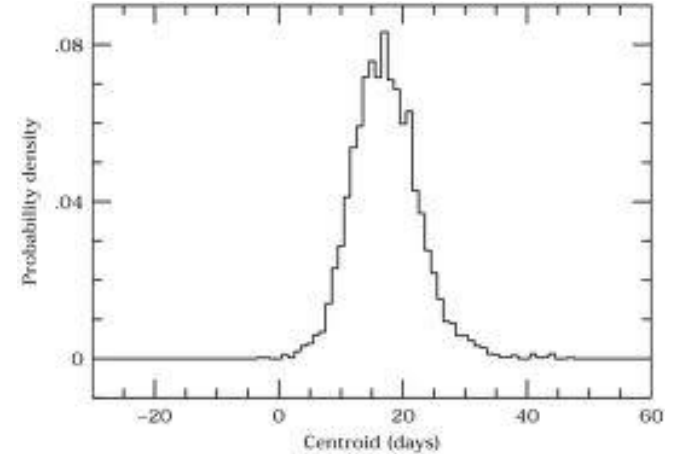
2차 미분한 스펙트럼(9점 구간)

4. 피크 중심채널의 결정

(1) 피크 중심채널의 결정방법

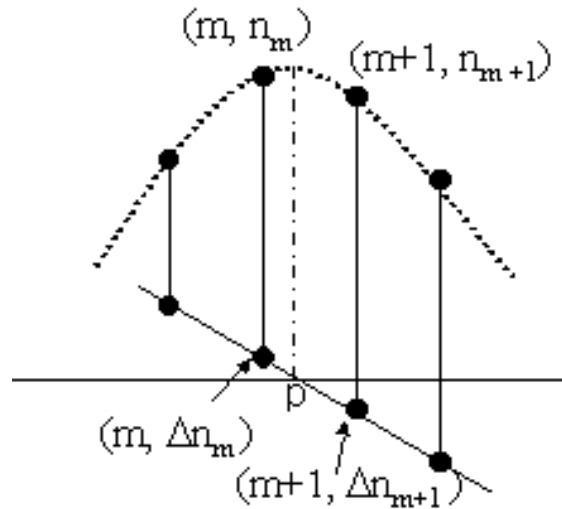
▪ 피크 중심채널의 결정방법(계산적 방법)

- ✓ 1차 미분계수 Zero-Cross 법
- ✓ 가중치 평균을 이용하는 방법
- ✓ 피크 근방의 3점 계수값에 의한 방법
- ✓ 지수함수로 변환하는 방법



4. 피크 중심채널의 결정

(2) 1차 미분계수 Zero-Cross 방법



$$p = m + \frac{\Delta n_m}{\Delta n_m - \Delta n_{m+1}}$$

평활화 1차미분계수

$$\Delta n_i = \frac{1}{a} \sum_{-k}^k k \cdot n_{i+k}$$

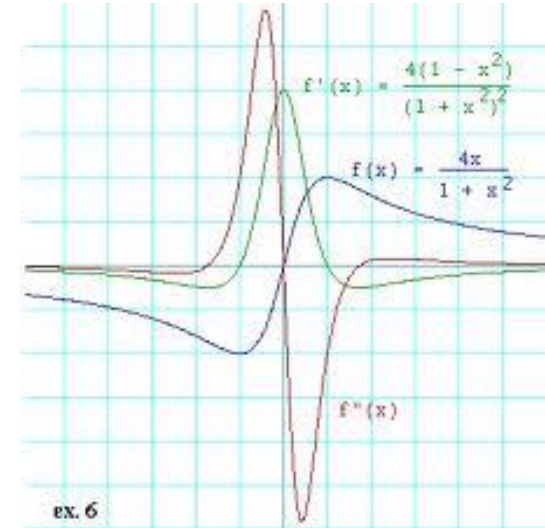
K=2 or 3정도가 적절

➤ K=2 일 때

$$\Delta n_i = \frac{1}{10} (-2n_{i-2} - n_{i-1} + n_{i+1} + 2n_{i+2})$$

➤ K=3 일 때

$$\Delta n_i = \frac{1}{28} (-3n_{i-3} - 2n_{i-2} - n_{i-1} + n_{i+1} + 2n_{i+2} + 3n_{i+3})$$



P는 $\Delta n_m > 0$, $\Delta n_{m+1} \leq 0$ 이어야 하는 조건, 조건이 만족하지 않으면 1채널 이동(좌 또는 우)

4. 피크 중심채널의 결정

(3) 가중치 평균을 이용하는 방법

- i 채널의 계수치 $n(i)$, 가중치 평균의 개념을 이용
- 가상 피크 중심을 포함한 앞, 뒤 k 채널에 대해서
- 채널과 계수의 곱으로 하는 값을 모두 합해서 중심 위치 p_i 를 구함

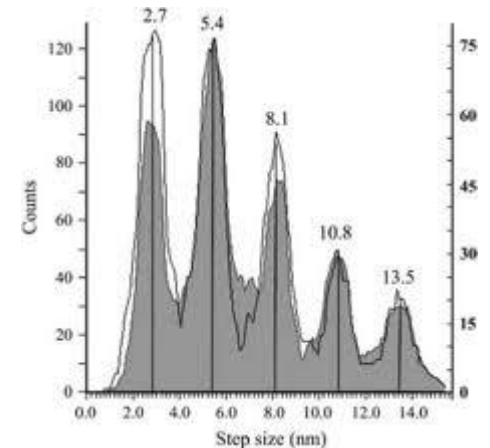
$$p_i = \sum_{j=i-k}^{i+k} [j \cdot n(j)]$$

- i 를 1채널씩 움직여서 P_i 를 구하고 그 최대 값을 P_{\max} 라 할 때, 피크 중심채널 p 는

$$p = \frac{P_{\max}}{\sum_{j=i-k}^{i+k} n(j)}$$

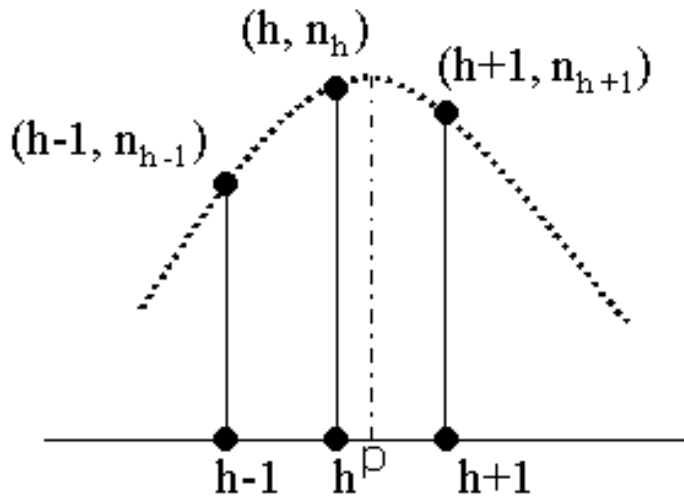
피크의 좌, 우 대칭이 좋지 않는 경우 또는 채널 수가 작게 되면

계산된 중심 채널이 실제의 중심 채널에서 크게 편기 되는 경향(실제 적용 곤란)



4. 피크 중심채널의 결정

(4) 3점 계수값에 의한 방법



3점 계수값에 의한 피크 중심

➤ Gauss함수로 근사

$$p = h + \frac{1}{2} \left[\frac{\ln\left(\frac{n_{h+1}}{n_{h-1}}\right)}{\ln\left(\frac{n_h^2}{n_{h+1} \cdot n_{h-1}}\right)} \right]$$

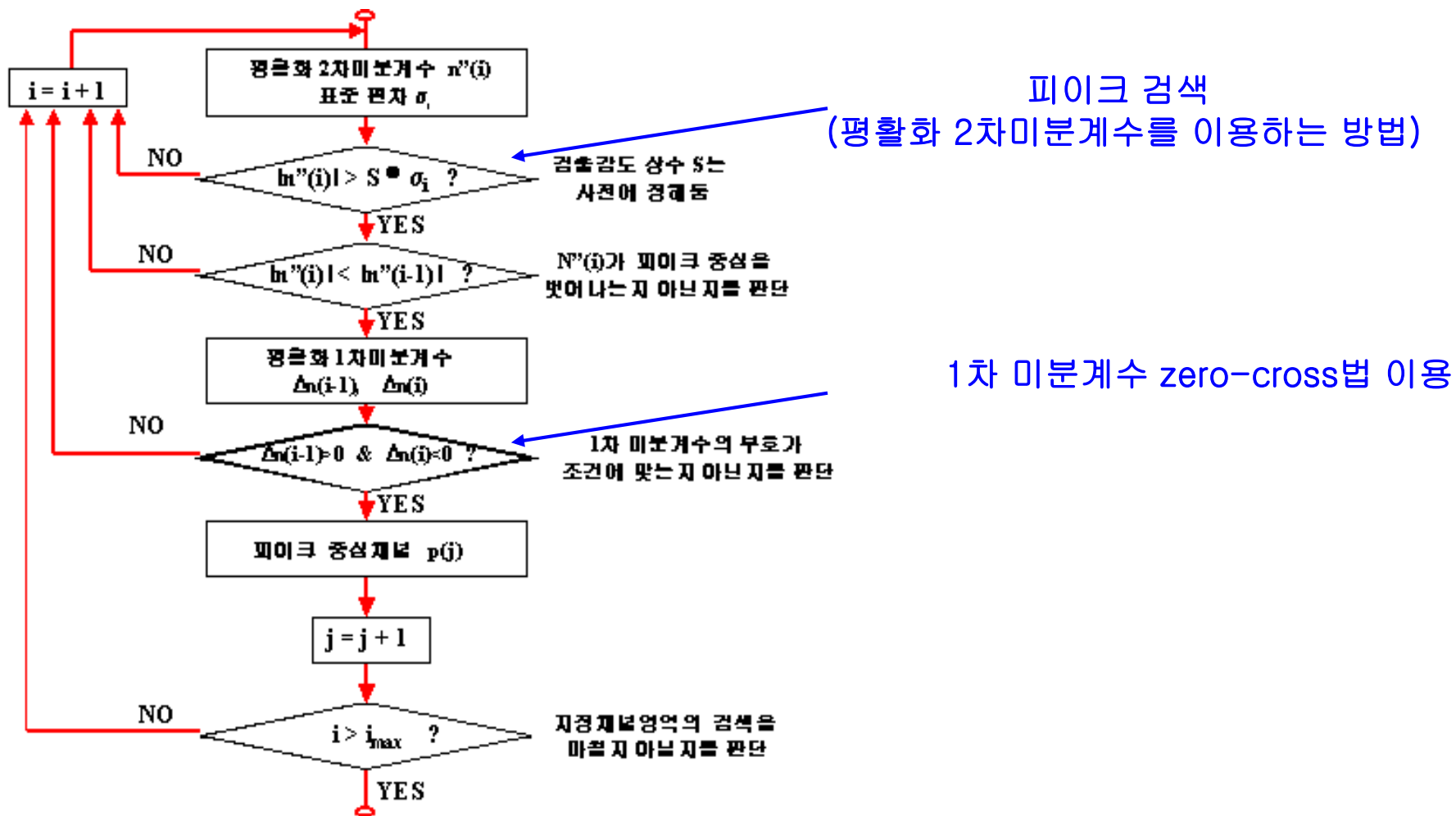
➤ 2차식으로 근사

$$p = h + \frac{1}{2} \left[\frac{(n_{h+1} - n_{h-1})}{(2n_h - n_{h+1} - n_{h-1})} \right]$$

피이크의 반치폭이 2~ 5채널 정도이고,
계수치의 통계적 요동이 적은 경우(계수치가 큰 값)에 적용

4. 피크 중심채널의 결정

(5) 피크 중심채널 계산방법 프로그램 흐름도

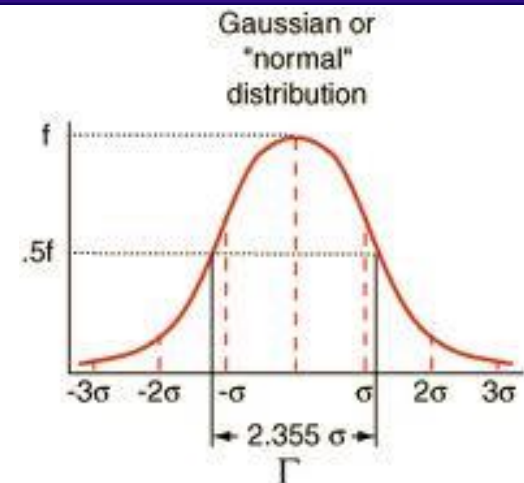
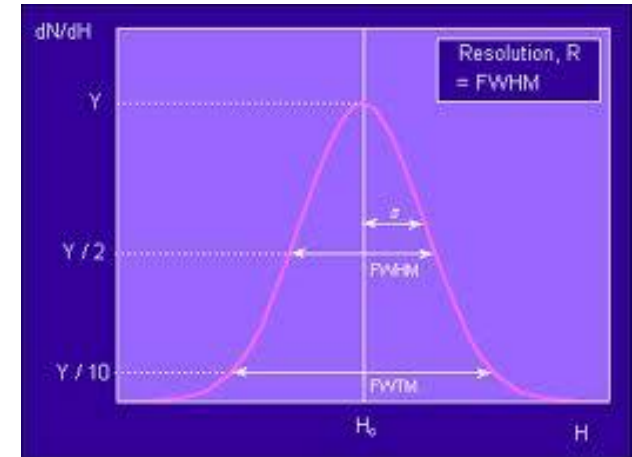


5. 피크 반치폭(FWHM)의 결정

(1) 피크 반치폭의 결정방법

▪ 피크 중심부분을 Gauss함수로 가정(계산)

- ✓ 지수함수로 변환하는 방법
- ✓ 정확한 피크중심을 가지고 구하는 방법
- ✓ 함수 fitting법(비선형 최소자승법)



5. 피크 반치폭(FWHM)의 결정

(2) 지수함수로 변환하는 방법

- i 를 변수로 해서 중심을 $i=p$ 라고 하고 Gauss함수를 $G(i)$ 라고 하면

$$F(i) = \frac{G(i-1)}{G(i+1)} = \exp[(2/\sigma^2) \cdot (i-p)]$$

F(i)=1 즉 $i=p$ 일 때 피크의 중심이 된다.

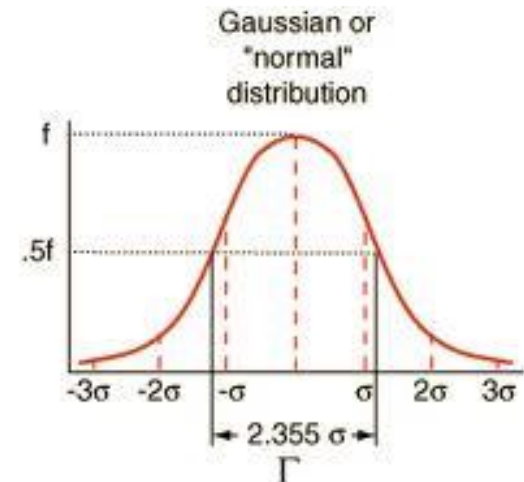
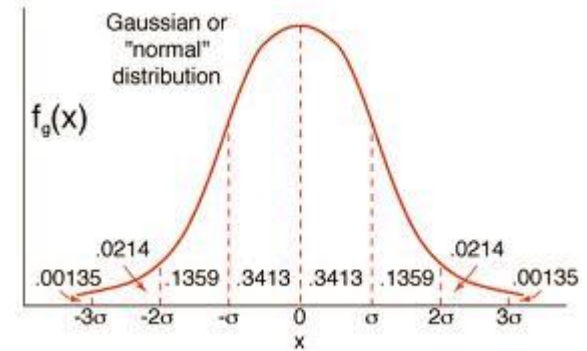
- 양변에 \ln 를 취하면

$$\ln F(i) = (2/\sigma^2) \cdot (i-p)$$

- $F(i)=10$ 이 되는 i (채널)를 a , $F(i)=0.1$ 이 되는 i (채널)를 b 라고 하면

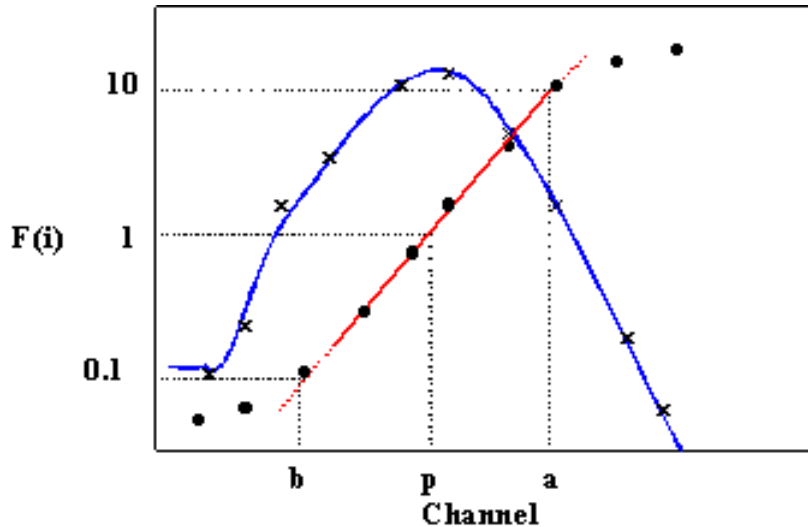
$$\sigma = \sqrt{2(a-b)/(\ln 10 - \ln 0.1)}$$

$$FWHM = 2.355\sigma = 1.552 \sqrt{(a-b)}$$



5. 피크 반치폭(FWHM)의 결정

(3) 지수함수로 변환하는 방법에 의한 피크 반치폭의 결정 예



실제 스펙트럼 Data에 적용순서

- 1) 피크 부분에 대해서 백그라운드(baseline) 계수를 뺀 후 그 값을 $G(i)$ 라 한다.
- 2) $G(i-1)$ 과 $G(i+1)$ 을 위 식에 대입하여 $F(i)$ 를 구하고
- 3) i 를 semi-log 그래프지의 가로축에
- 4) $F(i)$ 를 세로축으로 해서 plot한다.
- 5) 그림의 직선부분을 외삽 해서 $F(i)=10$ 이 되는 i 를 a 라고 두고
- 6) 동일한 방법으로 $F(i)=0.1$ 이 되는 i 를 b 라고 한다.
- 7) 최종적으로 위의 FWHM식을 이용해서 a, b 를 대입하여 반치폭을 구한다.

5. 피크 반치폭(FWHM)의 결정

(4) 정확한 피크 중심을 가지고 구하는 방법

- 피크의 높이를 A, 변수(ch)를 x, 피크 중심을 p라고 하면
- Gauss함수로 근사한 피크 함수 y는

$$y = A \exp[-2.773 \cdot ((x - p) / FWHM)^2]$$

$$\ln y = \ln A - 2.773 \cdot ((x - p) / FWHM)^2$$

$$Y = a + bX$$

$$Y = \ln y, \quad a = \ln A, \quad b = -2.773 / (FWHM)^2, \quad X = (x - p)^2$$

$$b = \frac{n \sum X_i Y_i - \sum X_i \sum Y_i}{n \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2}, \quad a = \frac{1}{n} (\sum Y_i - b \sum X_i)$$

$$FWHM = \sqrt{-2.773/b}, \quad A = \exp(a)$$

실제 스펙트럼 Data에 적용순서

- 1) 피크 중심부분에 대해서 백그라운드 (Baseline) 계수를 뺀 계수치를 y_i , 이 때의 채널을 x_i 로 둔다.
- 2) $Y_i (= \ln y_i)$ 및 $X_i (= (x_i - p)^2)$ 을 구한다.
- 3) 회귀분석법 식으로 a와 b를 구한다.
- 4) 위의 a와 b를 이용하여 FWHM 및 피크의 높이 A를 얻는다.
- 5) 또한 피크 면적은 $1.064(FWHM) \cdot A$ 가 된다.
- 6) FWHM 및 피크면적에 관한 오차를 필요한 경우 구한다

5. 피크 반치폭(FWHM)의 결정

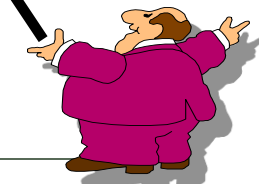
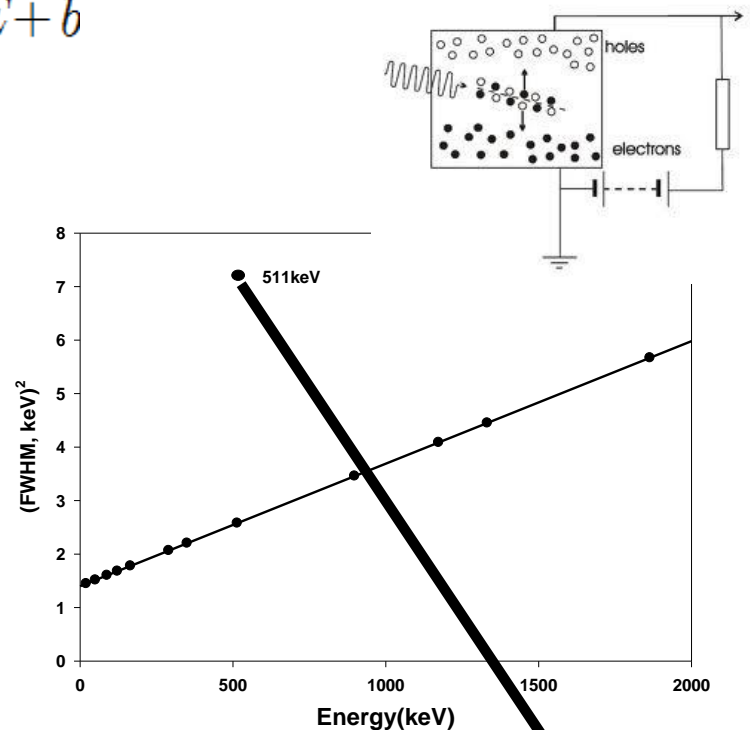
(5) 피크 반치폭에 기여하는 변수(인자)

- FWHM=생성전하의 통계적 요동 + 전자회로적 계통의 요동

$$(FWHM)^2 = (2.355)^2 \cdot F \cdot \epsilon \cdot E + \sigma_e^2 = aE + b$$

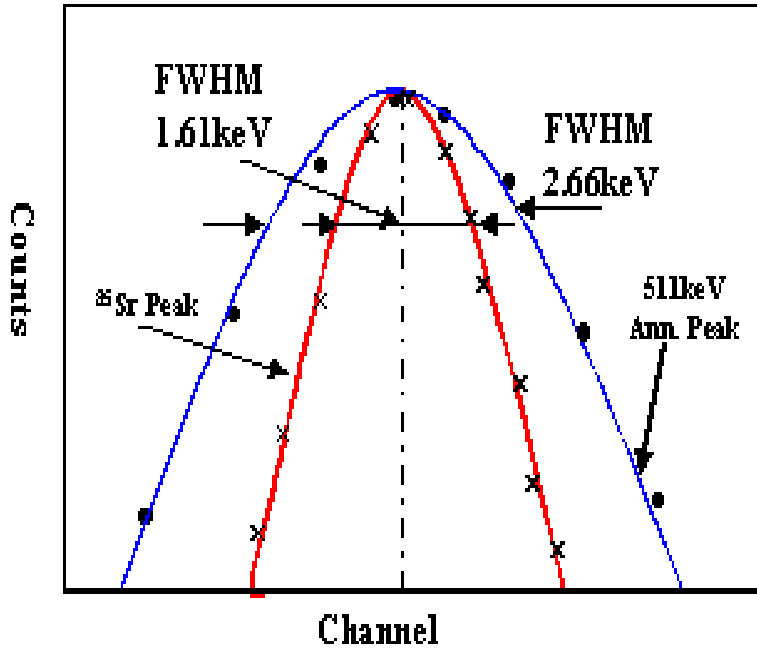
- (FWHM)²과 감마선에너지와의 관계를 나타낸 그림을 이용
- (FWHM)²=aE+b 식에 의한 직선의 관계가 성립
- 이 직선관계로부터 a=2.29 x 10⁻³ 과 b=1.40의 값을 구함
- a=(2.355)²·F·ε의 관계로부터 F=0.14, σ_e=1.2keV정도의 값을 가짐을 알 수 있음
- 양전자소멸방사선(511keV)의 FWHM은 직선관계로부터 크게 벗어나는 이유

쌍소멸을 한 상대전자의 운동량에 따른 도플러효과 때문
(약 1keV정도의 퍼짐이 생김).



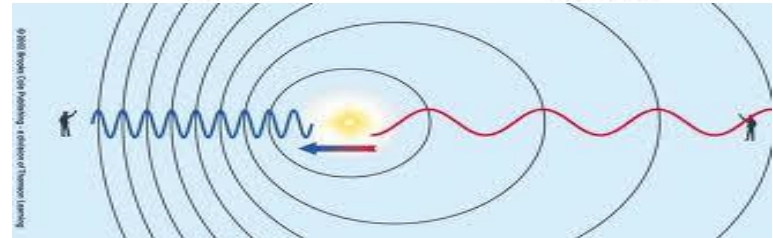
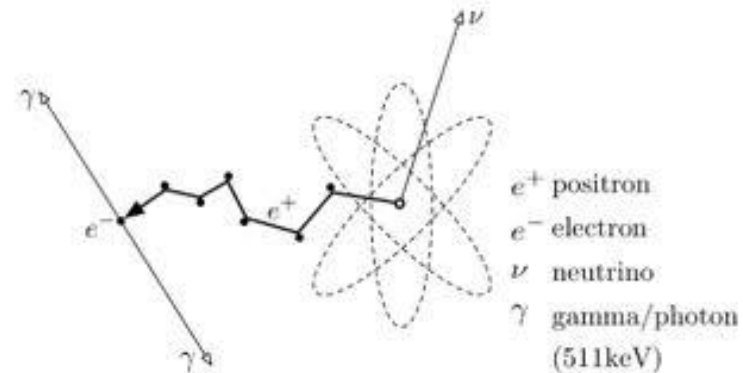
5. 피크 반치폭(FWHM)의 결정

(6) 양전자 소멸방사선 피크와 실제 감마선 피크와 반치폭 비교



양전자 소멸방사선(511keV)의 피크와 Sr-85의 감마선 피크(514keV)

- ▶ 양전자소멸방사선(511keV)의 FWHM이 ^{85}Sr 감마선 피크(514keV)의 FWHM보다 약 1keV정도 넓은
- ▶ Single escape 피크 역시 같은 이유에서 보다 넓은 FWHM을 가지게 됨
- ▶ 그러나 Double escape 피크는 넓어지지 않음에 유의



6. 피크 면적의 결정

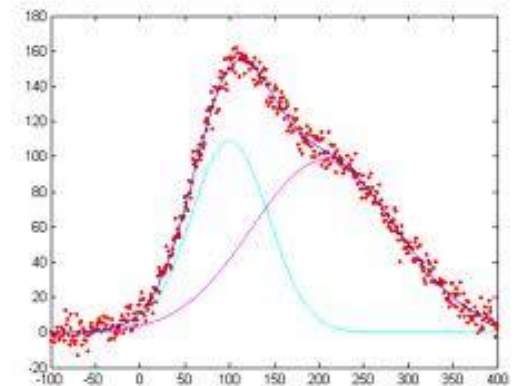
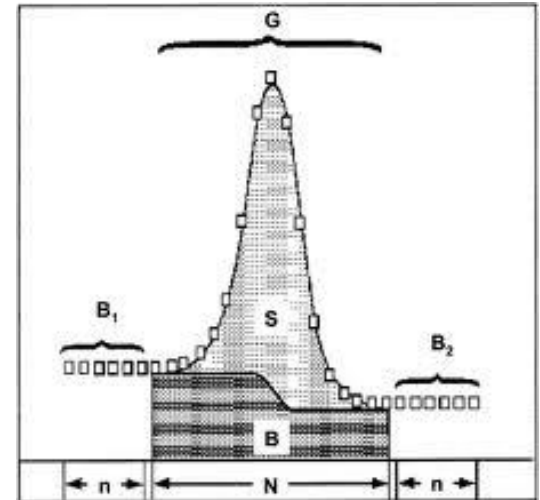
(1) 피크 면적의 결정방법

■ 계수값의 합산(summation)방법

- ✓ 계단(step-like)형 백그라운드(baseline)
- ✓ 직선형(1차식) 백그라운드(baseline)
- ✓ 곡선형(다항식) 백그라운드(baseline) ; Quittner법
- ✓ 관심피크의 백그라운드 영역에 다른 피크가 존재하는 경우
- ✓ 중첩 피크의 경우

■ 함수 fitting 방법

- ✓ 중첩된 피크의 해석에 적합
- ✓ 컴퓨터 필요(계산시간이 많이 소요) ; 컴퓨터 성능, 변수 등 관계
- ✓ 해석 프로그램을 만들기가 쉽지 않음



6. 피크 면적의 결정

(2) 해석영역의 설정

➤ 피크(Peak) 영역의 설정

- 피크의 저에너지 쪽 경계 l 과
- 고에너지 쪽 경계 h 의 정의

$$l \simeq p - 1.6FWHM, \quad h \simeq p + 1.4FWHM, \quad h - l \simeq 3FWHM,$$

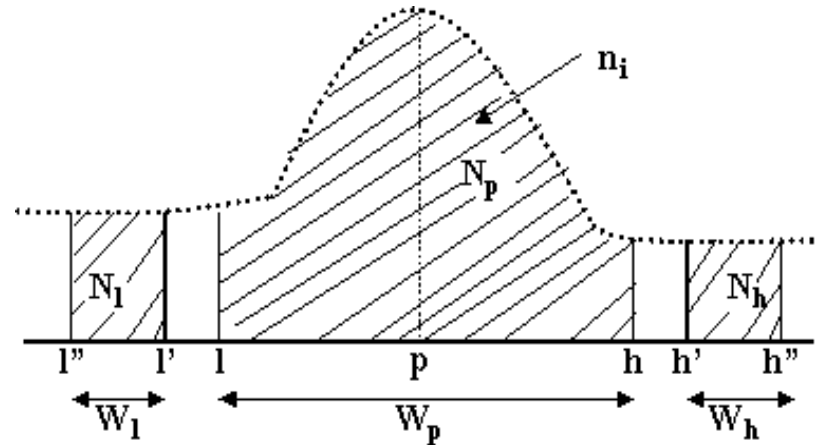
➤ 백그라운드(Baseline) 영역의 설정

- 저에너지 쪽 백그라운드 경계(l'' 로부터 l' 까지)

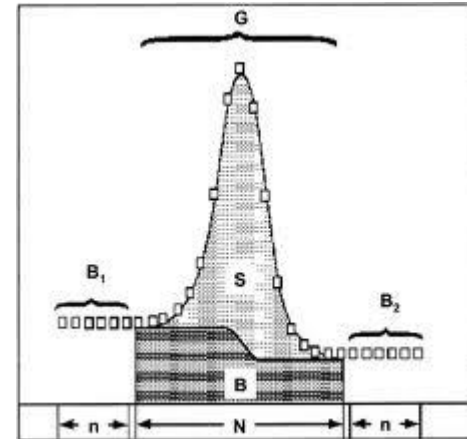
$$l' - l'' \geq \frac{1}{2}(h - l) \text{에서 정수값,} \quad \text{단 } l' \leq l - 1$$

- 고에너지 쪽 백그라운드 경계(h' 로부터 h'' 까지)

$$h'' - h' \geq \frac{1}{2}(h - l) \text{에서 정수값,} \quad \text{단 } h' \leq h + 1$$



피크 및 백그라운드 영역의 설정



6. 피크 면적의 결정

(3) 계단형 백그라운드(Baseline)에 의한 피크면적의 계산

$$N_p = \sum_{i=l}^h n_i, \quad N_l = \sum_{i=l''}^{l'} n_i, \quad N_h = \sum_{i=h'}^{h''} n_i$$

피이크 면적

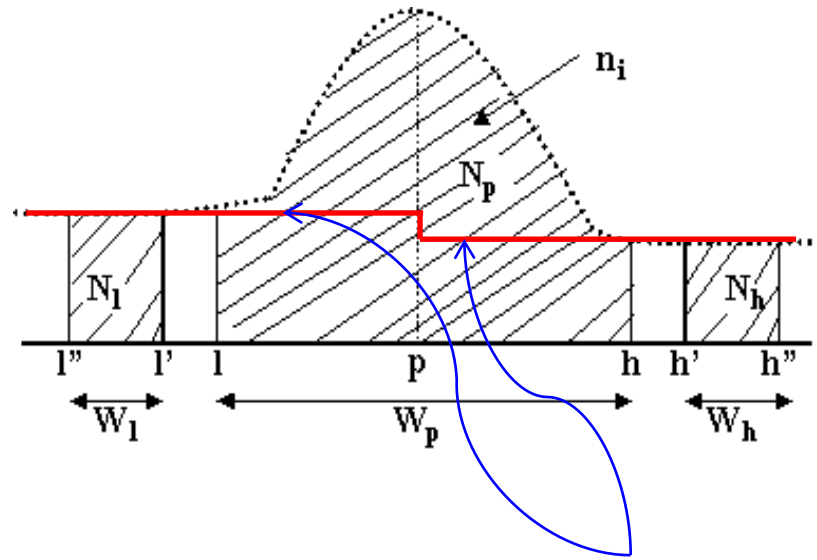
$$S_p = N_p - \beta_l N_l - \beta_h N_h$$

Sp에 대한 통계오차

$$\sigma_s = \sqrt{N_p + \beta_l^2 N_l + \beta_h^2 N_h}$$

여기서 $W_p = h - l + 1$, $W_l = l' - l'' + 1$, $W_h = h'' - h' + 1$ 이라고 하면

$$\beta_l = \frac{W_p}{2W_l}, \quad \beta_h = \frac{W_p}{2W_h}$$



계단형 백그라운드

$W_p = W_l + W_h$, $W_l = W_h$ 또는 $W_l = W_h + 1$ 이라고 하면 $\beta_l = \beta_h = 1$ 이 되어서 계산이 용이

6. 피크 면적의 결정

(4) 직선형(1차식) 백그라운드에 의한 피크면적의 계산

$$N_p = \sum_{i=l}^h n_i, \quad N_l = \sum_{i=l''}^{l'} n_i, \quad N_h = \sum_{i=h'}^{h''} n_i$$

피이크 면적

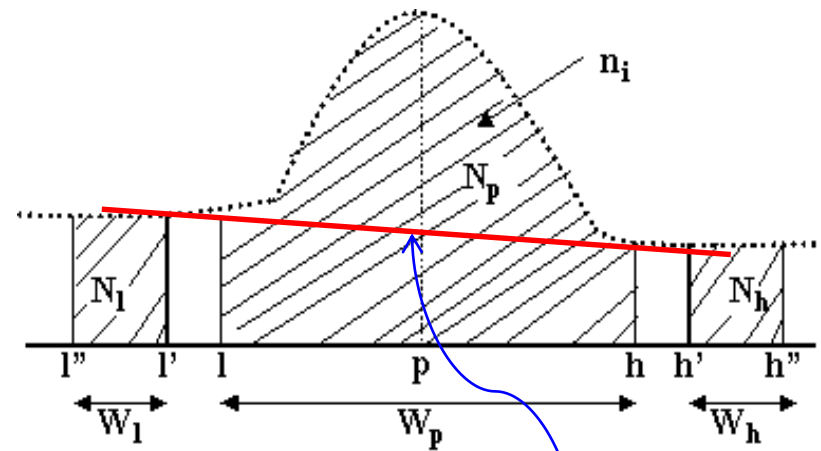
$$S_p = N_p - \beta_l N_l - \beta_h N_h$$

Sp에 대한 통계오차

$$\sigma_s = \sqrt{N_p + \beta_l^2 N_l + \beta_h^2 N_h}$$

여기서 $W_p = h - l + 1$, $W_l = l' - l'' + 1$, $W_h = h'' - h' + 1$ 이라고 하면

$$\beta_l = \frac{W_p (h' + h'' - l - h)}{W_l (h' + h'' - l'' - l')}, \quad \beta_h = \frac{W_p (l + h - l' - l'')}{W_h (h' + h'' - l'' - l')}$$



직선형 백그라운드

6. 피크 면적의 결정

(5) 계단형 및 직선형(1차식) 백그라운드에 의한 피크면적의 계산 예

- FWHM은 약 2ch정도, 따라서 각 영역의 설정을 다음과 같이 정할 수 있음.

$l=485\text{ch}$, $h=492\text{ch}$, $l'=480\text{ch}$, $l''=484\text{ch}$, $h'=493\text{ch}$, $h''=497\text{ch}$

$$N_p = \sum_{i=485}^{492} n_i = 1388, \quad N_l = \sum_{i=480}^{484} n_i = 132, \quad N_h = \sum_{i=493}^{497} n_i = 119$$

- 계단형 백그라운드 경우

$$W_p = h - l + 1 = 492 - 485 + 1 = 8,$$

$$W_l = l' - l'' + 1 = 484 - 480 + 1 = 5,$$

$$W_h = h'' - h' + 1 = 497 - 493 + 1 = 5$$

$$\beta_l = \frac{W_p}{2W_l} = \frac{8}{10} = 0.8, \quad \beta_h = \frac{W_p}{2W_h} = \frac{8}{10} = 0.8,$$

$$S_p = N_p - \beta_l N_l - \beta_h N_h = 1388 - 0.8 \times 132 - 0.8 \times 119 = 1187$$

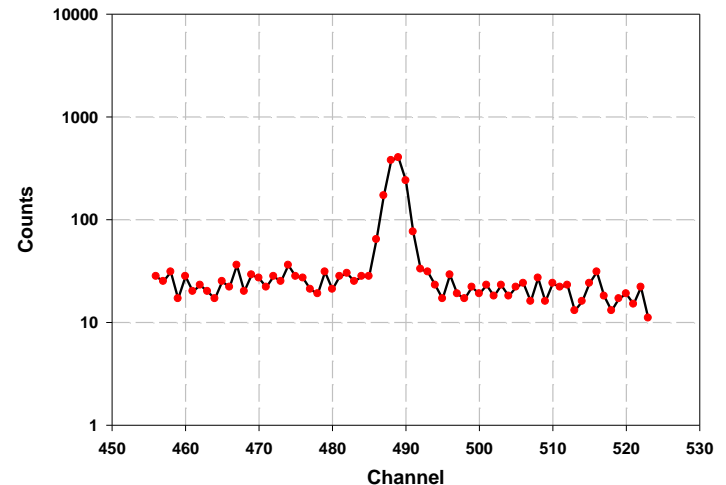
$$\sigma_s = \sqrt{N_p + \beta_l^2 N_l + \beta_h^2 N_h} = 39$$

- 직선형 백그라운드 경우

$$\beta_l = \frac{W_p (h' + h'' - l - h)}{W_l (h' + h'' - l'' - l')} = \frac{8}{5} \times \frac{13}{26} = 0.8,$$

$$\beta_h = \frac{W_p (l + h - l' - l'')}{W_h (h' + h'' - l'' - l')} = \frac{8}{5} \times \frac{13}{26} = 0.8,$$

Channel (i)	계수치 n(i)
456	28, 25, 31, 17, 28, 20, 23, 20, 17, 25,
466	22, 36, 20, 29, 27, 22, 28, 25, 36, 28,
476	27, 21, 19, 31, 21, 28, 30, 25, 28, 28,
486	64, 171, 376, 401, 239, 76, 33, 31, 23, 17,
496	29, 19, 17, 22, 19, 23, 18, 23, 18, 22,
506	24, 16, 27, 16, 24, 22, 23, 13, 16, 24,
516	31, 18, 13, 17, 19, 15, 22, 11



6. 피크 면적의 결정

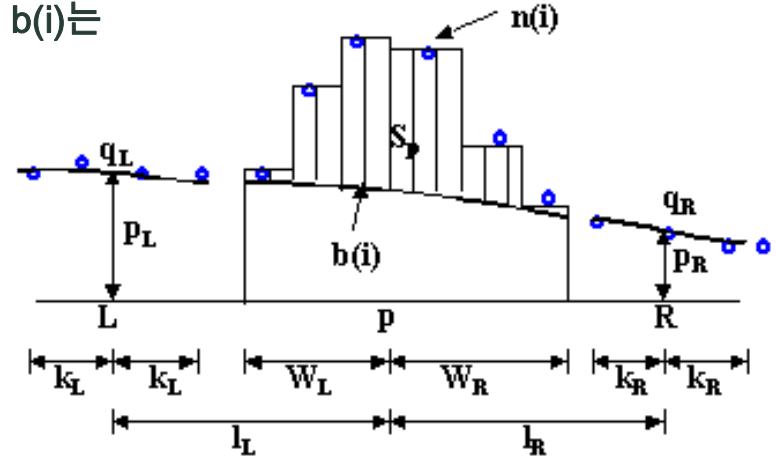
(6) 곡선형(다항식) 백그라운드에 의한 피크면적의 계산 ; Quittner법

- 백그라운드를 3차식으로 가정하면 i 채널의 백그라운드 함수 b(i)는

$$b(i) = p_L + q_L(i-L) + \left[\frac{-q_R - 2q_L}{l_L + l_R} + \frac{3(p_R - p_L)}{(l_L + l_R)^2} \right] (i-L)^2$$

$$+ \left[\frac{q_L + q_R}{(l_L + l_R)^2} + \frac{2(p_L - p_R)}{(l_L + l_R)^3} \right] (i-L)^3$$

- 피크면적 S_p 는
$$S_p = \sum_{i=p-W_L}^{p+W_R} [n(i) - b(i)]$$



- p_L 과 p_R 및 q_L 과 q_R 은 k_L 과 k_R 의 값으로 다음과 같이 나타낼 수 있다.
(단 다음 식에 있어서 $M=L$ 또는 R 이라고 하자)

다항식 최소자승법에 의한 곡선 Baseline과 피크면적

$$p_M = \frac{1}{N_k} \sum_{j=-kM}^{kM} c_j n(M+j), \quad q_M = \frac{1}{D_k} \sum_{j=-kM}^{kM} j \cdot n(M+j)$$

6. 피크 면적의 결정

(7) 관심피크의 백그라운드 영역에 다른 피크가 존재하는 경우

- 1) 백그라운드 영역은 방해 피크(p')를 완전히 포함해서 정한다.
- 2) 방해 기준피크(p'')의 피크면적 $S_{p''}$ 와 그 오차 $s_{p''}$ 를 구한다.
- 3) 방해피크(p')의 피크면적 $S_{p'}$ 은 기여계수 ν 를 써서 표현하면

$$S_{p'} = \nu S_{p''}, \quad \text{여기서 } \nu = \frac{a'}{a''} \frac{\epsilon'}{\epsilon''}$$

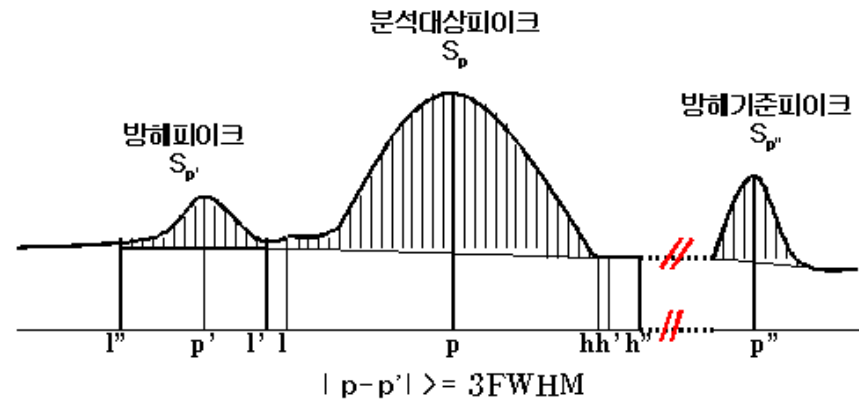
a' 과 a'' 는 피크 p'와 p''에 대한 감마선 방출확률,
 ϵ' 와 ϵ'' 는 각각 피크의 감마선에 대한 피크 효율

- 4) 저에너지쪽 백그라운드에 방해 피크가 있는 경우

$$S_p = N_p - \beta_l(N_l - \nu S_{p''}) - \beta_h N_h$$

$$\sigma_s = \sqrt{N_p + \beta_l^2 N_l + \beta_h^2 N_h + (\nu \beta_l \sigma_{p''})^2}$$

- 5) 고에너지쪽 백그라운드에 방해 피크가 있는 경우
 위의 식에서 l 을 h 로 대체



6. 피크 면적의 결정

(8) 분석대상 피크 영역내에 다른 피크가 존재하는 중첩피크의 경우

1) 만약 2피크가 동일 핵종에 의한 것일 경우

$$S_p = \frac{a}{a+a'} S_{p+p'}, \quad \sigma_p = \frac{a}{a+a'} \sigma_{p+p'}$$

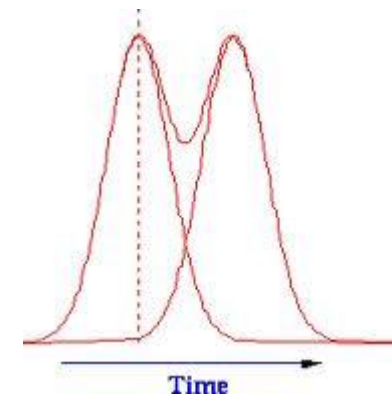
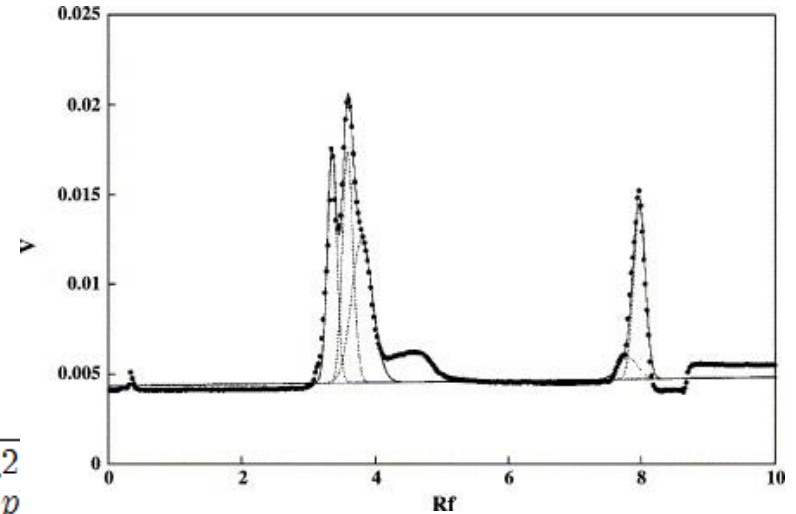
a과 a'는 피크 p와 p'에 대한 감마선 방출확률

2) 서로 다른 핵종인 경우

$$S_p = S_{p+p'} - \nu S_{p''}, \quad \sigma_p = \sqrt{\sigma_{p+p'}^2 + \nu^2 \sigma_{p''}^2}$$

여기서
$$\nu = \frac{a'}{a''} \frac{\epsilon'}{\epsilon''}$$

a'과 a''는 피크 p'와 p''에 대한 감마선 방출확률,
 ε'와 ε''는 각각 피크의 감마선에 대한 피크 효율



7. 최소자승법에 의한 스펙트럼 함수 fitting법

(1) 선형 최소자승법

➤ 선형최소자승법의 스펙트럼해석에 응용

- 가정한 스펙트럼함수를 $f(i, c_k)$ 라고 하고
- 미지의 파라미터 $c_k(k=1,2,\dots)$ 는 모두 $f(i, c_k)$ 에 선형적으로 합쳐져 있을 때
- i 채널에 있어서 계수치를 y_i 라고 하고, 스펙트럼함수를

$$f(i, c_k) = c_1 f_1(i) + c_2 f_2(i) + \dots \quad Q = \sum_i W_i [f(i, c_k) - y_i]^2$$

- W_i 는 가중치 함수이고 보통 $W_i=1/y_i$ 또는 1로 그대로 하는 경우가 많음
- Q 가 최소가 되는 조건 ; $\partial Q/\partial c_k = 0$ 되는 관계로서 k 와 같은 수의 방정식을 얻는다
- 따라서 k 개의 연립방정식을 풀어서 미지의 파라미터 $c_k(k=1,2,\dots)$ 를 구하고
- 이로부터 스펙트럼 함수가 결정된다.

◆ 감마선 스펙트럼함수 : 단순한 Gauss함수의 피크 + 1차식 백그라운드의 조합

$$f(i, c_k) = c_1 + c_2(i - l) + \sum_n [c_{3n} \exp(-c_{3n+1}(i - c_{3n+2})^2)]$$

7. 최소자승법에 의한 스펙트럼 함수 fitting법

(2) 비선형 최소자승법

- 선형 최소자승법 ; 선형 파라미터만(예를 들면 다항식 baseline함수의 각 상수와 피크함수의 높이)을 구함
- 비선형 최소자승법 ; 피크의 중심, FWHM 및 그 외의 비선형 파라미터를 구할 수가 있음
- 스펙트럼 함수 $f(i, c_k)$ 를 가정해서 $c_k(k=1,2, \dots, m)$ 는 초기추정치 $c_k^0(k=1,2, \dots, m)$ 를 사용해서 측차 계산으로 참값에 근사
- 참값의 파라미터 c_k 는 c_k^0 에 근사 시키기 위해서 $f(i, c_k)$ 를 c_k^0 를 중심으로 Taylor전개하고 그 1차항까지 만으로 선형근사

$$Q = \sum_i W_i \left[f(i, c_k^0) - y_i + \sum_k \frac{\partial f(i, c_k^0)}{\partial c_k^0} \delta c_k \right]^2$$

- Q를 최소화하는 조건은 $\partial Q / \partial (\delta c_k) = 0$ 되는 관계로서 k수 만큼의 정규방정식이 얻어진다.
- 이 연립방정식의 해를 구해서 $\delta c_k(k=1,2,\dots)$ 를 구하고
- $c_k^0 + \delta c_k$ 를 그 다음의 c_k^0 로 주고 다시 동일한 계산을 하는 것을 반복한다.
- δc_k 가 충분히 작아졌다고 판단되면 계산을 종료한다.

- ◆ 감마선 스펙트럼함수 : 피크의 중심채널 및 FWHM을 모름(비선형적으로 포함)
1개의 단순한 Gauss함수의 피크 + 1차식 백그라운드의 조합

$$f(i, c_k) = c_1 + c_2(i - c_5) + c_3 \exp[-c_4(i - c_5)^2]$$

여기서 c_1 과 c_2 : 1차식 baseline의 미지의 파라미터, c_3 : 피크 높이, $c_4 : 2.773/w^2, w=FWHM$, c_5 : 피크의 중심채널

8. 스펙트럼 형태함수

▶ 단순한 Gauss 함수의 피크와 1차식 백그라운드의 조합

$$f(i, c_k) = c_1 + c_2(i-l) + \sum_n [c_{3n} \exp(-c_{3n+1}(i-c_{3n+2})^2)]$$

여기서 c_1 과 c_2 ; 직선 baseline, c_{3n} ; n개의 피크가 포함되어 있는 경우의 피크 높이, $c_{3n+1}(=2.773/(FWHM)^2)$; 피크 폭 c_{3n+2} ; 피크 중심, l ; 해석영역내의 임의의 채널(예를 들면 해석영역내의 최소채널)

- 선형 최소자승법에서는 $c_1, c_2,$ 및 c_{3n} , 만을 미지 파라미터로서 구하고 c_{3n+1} 과 c_{3n+2} 는 다른 방법으로 주어짐
 - 따라서 피크의 수가 n개 이므로 n+2개의 연립방정식을 한번 해를 구하는 꼴
- 비선형 최소자승법은 3n+2개의 연립방정식을 반복적으로 여러 번 해를 구하는 꼴
- 위 식의 함수로서도 피크면적의 fitting 계통오차를 1% 이내로 구할 수 있는 것이 대다수

▶ Robinson 형태함수 (그림 A)

$$f(i) = A \exp[-\frac{1}{2}(\frac{i-p}{\sigma})^2] + c[\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \tan^{-1}(\frac{p-b\sigma-i}{a\sigma})] + D[-\frac{1}{2}(\frac{i-p+q\sigma}{\sigma})^2] + B(i)$$

- (1) 피크의 주성분 ; Gauss 함수,
- (2) 고에너지 쪽의 백그라운드 ; 1차식
- (3) 저에너지 쪽에 첨가된 백그라운드 ; \tan^{-1} 함수
- (4) 피크 시작부분의 tail ; 다른 Gauss함수로 나타낸 것

▶ Routti 형태함수 (그림 B)

$$f_1(i) = A \exp[\frac{1}{2}l \frac{(2i-2p+l)}{\sigma^2}] + B(i), \quad i < p-l$$

$$f_2(i) = A \exp[-\frac{1}{2}(\frac{i-p}{\sigma})^2] + B(i), \quad p-l \leq i \leq p+h$$

$$f_3(i) = A \exp[\frac{1}{2}h \frac{(2p-2i+h)}{\sigma^2}] + B(i), \quad i > p+h$$

