

文章编号: 2095-4980(2020)03-0527-04

## 一种单能高斯峰解析方法

陈伟<sup>1,2</sup>, 方方<sup>\*2</sup>, 莫磊<sup>1</sup>, 洪旭<sup>2</sup>, 喻杰<sup>2</sup>

(1.成都航空职业技术学院 信息工程学院, 四川 成都 610100; 2.成都理工大学 核技术与自动化工程学院, 四川 成都 610059)

**摘要:** 针对核能谱解析中, 单能峰会受到低能拖尾和高能拖尾的影响, 给出了先根据单能峰半高宽读数值来确定数据拟合窗, 再运用快速迭代算法进行高斯函数拟合的方法。文中先进行了含噪高斯信号拟合实验, 然后在实测 X 荧光能谱中对不同含量的单能峰进行快速高斯拟合应用。实验表明, 本方法对高含量核素的单能峰拟合效果良好, 对高背景低含量核素的单能峰需先进行平滑处理再做拟合。

**关键词:** 单能峰; 高斯拟合; 最小二乘拟合; 拟合窗宽; 核能谱

**中图分类号:** TN919.5; TL84

**文献标志码:** A

**doi:** 10.11805/TKYDA2019121

## An analytical method of single energy Gauss peak

CHEN Wei<sup>1,2</sup>, FANG Fang<sup>\*2</sup>, MO Lei<sup>1</sup>, HONG Xu<sup>2</sup>, YU Jie<sup>2</sup>

(1.College of Information Engineering, Chengdu Aeronautic Polytechnic, Chengdu Sichuan 610100, China;

2.College of Nuclear Technology and Automation Engineering, Chengdu University of Technology, Chengdu Sichuan 610059, China)

**Abstract:** In the analysis of nuclear energy spectrum, the single energy peak is affected by low energy tail and high energy tail. Therefore, a method is proposed in which the data fitting window is determined by the full width at half maxima values of single energy peak, and then the Gaussian function fitting method is applied by using fast iterative algorithm. In this paper, the Gaussian signal fitting experiment with noise is carried out, then, the single energy peaks with different contents in the actual measured X-ray fluorescence spectrum are fitted by fast Gaussian method. The results show that this method has a good fitting effect on the single energy peak of high content nuclides, and the single energy peak of high background and low content nuclides should be smoothed before fitting.

**Keywords:** single energy peak; Gaussian fitting; least square fitting; width of fitting window; nuclear spectrum

核能谱解析时通常从特征峰峰位和峰面积中提取核素信息, 常用峰面积计算方法有直接相加法和函数拟合法。函数拟合法是用一个特征函数来描述特征峰, 有效抑制了直接相加法中放射性统计涨落对核素信息提取的影响。高斯函数常用作核能谱解析时的单峰拟合函数, 传统高斯拟合参数求解时计算较复杂, 不利于在嵌入式设备中实现。

文献[1-5]求解了高斯函数的特征值, 并对高斯函数拟合的工程应用做了阐述。孙桂玲等<sup>[6]</sup>综合了 Newton-Raphson 逐步逼近法和快速下降法求最小值问题, 结合 Levenberg-Marquardt(LM)算法, 构造了将谱图曲线中的两个高斯峰分离的算法, 从中得到峰面积、峰高、位置等参数, 但该方法对迭代初值敏感。顾民等<sup>[7]</sup>通过高斯函数的第二特征函数得到高斯函数的幅值、中心及方差。实测核能谱特征峰会受到低能拖尾和高能拖尾函数等因素的影响<sup>[8]</sup>, 如直接对整个单能峰进行拟合会产生误差。为此, 本文探讨利用单能峰半高宽(Full Width at Half Maximum, FWHM)读数值来确定参与拟合运算的数据窗长度(拟合窗宽  $w$ ), 并利用快速迭代方法实现单能高斯峰参数和峰面积的求解。

收稿日期: 2019-04-11; 修回日期: 2019-07-11

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(41774140); 四川省教育厅科研资助项目(18ZA0041); 成都航院校级资助项目(062002)

作者简介: 陈伟(1978-), 男, 博士, 讲师, 主要研究方向为测控技术。email:ndew@qq.com

\*通信作者: 方方 email:ffsjp2004@qq.com

## 1 高斯函数拟合原理

核能谱单能峰扣除背景后, 其净计数近似服从高斯分布:

$$y(x) = A \cdot \exp[-4 \ln 2 (x - \mu)^2 / FWHM^2] \quad (1)$$

式中:  $x$  为道址数;  $y(x)$  为与道址对应的计数值或计数率;  $A$  为峰值;  $\mu$  为峰位道址;  $FWHM$  为半高宽。

峰面积由式(1)的积分求得:

$$s = \int y(x) dx = 1.065 \times FWHM \times A \quad (2)$$

记  $FWHM$  为  $h$ , 对式(1)等式两边取自然对数, 整理相同系数项可得二次多项式函数:

$$b = c_1 x^2 + c_2 x + c_3 \quad (3)$$

$$b = \ln y(x), c_1 = -4 \ln 2 \frac{1}{h^2}, c_2 = 8 \ln 2 \frac{\mu}{h^2}, c_3 = -4 \ln 2 \frac{\mu^2}{h^2} + \ln A \quad (4)$$

式(3)可以表示如下:

$$\begin{pmatrix} x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^2 & x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_w^2 & x_w & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_w \end{pmatrix} \quad (5)$$

采用最小二乘法求解超定方程组式(5), 经一系列推导可得:

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^w x_i^4 & \sum_{i=1}^w x_i^3 & \sum_{i=1}^w x_i^2 \\ \sum_{i=1}^w x_i^3 & \sum_{i=1}^w x_i^2 & \sum_{i=1}^w x_i \\ \sum_{i=1}^w x_i^2 & \sum_{i=1}^w x_i & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^w x_i^2 b_i \\ \sum_{i=1}^w x_i b_i \\ \sum_{i=1}^w b_i \end{pmatrix} \quad (6)$$

式中:  $x_i$  表示道址;  $w$  为参与拟合运算的数据窗长度,  $w$  一般取奇数。在做单能高斯峰拟合时, 需先确定拟合数据窗宽, 然后将其代入式(6), 求出系数  $c_1, c_2, c_3$ , 再由式(4)解出高斯参数  $h^2, \mu, A$ , 最后代入式(1)求出高斯拟合函数, 代入式(2)可求得高斯峰面积。以上提出的高斯函数快速拟合方法, 避免了传统求解过程中的逆运算, 使高斯拟合参数的求解变得简洁快速, 方便在嵌入式设备和计算机中应用。

## 2 含噪信号高斯拟合

采用式(6)快速拟合算法对高斯标准函数实验发现, 当  $w$  值大于等于 3 时, 可准确拟合出与原参数相同的高斯参数。因拟合时的最小二乘算法具有数据平滑功能, 拟合含噪信号时, 只需选择合适数据长度, 就可求出高斯参数。取噪声函数:

$$n(x) = (A/k)(0.5 - rand) \quad (7)$$

式中:  $k$  为噪声幅值抑制系数;  $rand$  为取值区间在(0,1)随机数。则含噪高斯信号为:

$$f(x) = y(x) + n(x) = A \cdot \exp[-4 \ln 2 (x - \mu)^2 / FWHM^2] + (A/k)(0.5 - rand) \quad (8)$$

对式(8)取参数  $A=35, \mu=510, FWHM=38, k=20$ , 可得含噪高斯信号。高斯峰的  $FWHM$  与拐点宽度  $\sigma$  的关系:

$$FWHM = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma \approx 2.35482 \sigma \quad (9)$$

由式(9),  $FWHM$  取 38 时,  $\sigma=16.1371$ , 因此拟合窗宽  $w$  分别取  $17(\sigma), 25(1.5\sigma), 39(FWHM), 65(\pm 2\sigma), 97(\pm 3\sigma)$ 。利用 Matlab 2016b 编程, 保持式(8)的实验参数不变, 对每个  $w$  内的数据连续拟合 10 000 次, 对拟合所得参数  $A, \mu, FWHM$  的期望与标准差进行统计分析, 结果见表 1。

表 1 不同窗宽  $w$  时 10 000 次含噪信号高斯拟合  
Table 1 10 000 times noise signal with different  $w$

fitting parameter	$w=17$		$w=25$		$w=39$		$w=65$		$w=97$	
	expectation $\mu$	standard deviation $\sigma$	expectation $\mu$	standard deviation $\sigma$	expectation $\mu$	standard deviation $\sigma$	expectation $\mu$	standard deviation $\sigma$	expectation $\mu$	standard deviation $\sigma$
$A$	35.003 0	0.176 0	34.999 7	0.153 9	35.002 4	0.142 8	35.021 3	0.215 4	35.873 2	2.381 3
$M$	509.995 6	0.193 4	509.998 2	0.120 5	509.999 9	0.083 4	510.001 7	0.112 0	509.998 4	0.842 6
$FWHM$	38.007 8	1.343 4	37.991 2	0.626 6	37.987 7	0.298 5	37.958 7	0.267 1	37.079 1	1.365 2

由表 1 可知，各拟合窗宽  $w$  对应拟合参数  $A, \mu, FWHM$  的期望值与标准高斯参数相近，但各拟合参数的标准差在  $w=39$  附近最小，说明参与拟合的数据窗宽为  $FWHM$  时，高斯最小二乘拟合效果最好。

保持式(8)的实验参数不变， $w$  取 39，利用式(6)做快速高斯函数拟合，随机选取一次拟合数据，其拟合参数为： $A=35.051 2, \mu=509.934 3, FWHM=38.180 3$ ，截取 445~575 道的数据绘图，如图 1 所示。图 1 中， $v_1$  为高斯标准曲线， $v_2$  为加入了噪声的高斯曲线， $v_3$  为乘拟合后的高斯标准曲线。由图 1 中的主图及其局部放大图可知，拟合后曲线  $v_3$  与原曲线  $v_1$  符合良好。

由实验发现，单能含噪高斯峰的拟合方法如下：a) 确定拟合数据窗宽  $w$ ：根据实测谱峰中  $FWHM$  读数值确定  $w$ ，使  $w-1$  等于或略大于  $FWHM$ ；b) 拟合数据选取：在峰位左右两侧各取  $(w-1)/2$  个数据；c) 代入式(6)中求单能高斯拟合参数，进而确定峰位和峰面积。

### 3 实测能谱应用

受探测器缺陷和电荷不完全收集的影响，低能量特征峰会产生拖尾；对于高能量特征峰，光子在探测器中的康普顿散射也会造成特征峰有拖尾<sup>[8]</sup>。因此，拟合实测能谱的单能峰时，选择受小高斯函数影响较小的特征峰的上半部分数据，与本文提出的根据  $FWHM$  选取拟合窗方法相符。

#### 3.1 高含量单能峰拟合

选取某地矿石的实测 X 荧光能谱(原谱)，用统计敏感的非线性迭代剥峰算法(Statistics-sensitive Nonlinear Iterative Peak-clipping, SNIP)算法扣除背景(扣背景谱)。分析特征峰数据可知：Mo 特征峰位于 1 267 道，原谱的峰值为 23.010 7，扣背景谱的峰值为 22.718 6；扣背景前后特征峰的  $FWHM$  均约为 19。因此  $w$  设为 21，分别对原谱和扣背景谱，采用式(6)做快速高斯函数拟合。可得原谱的拟合高斯参数为： $A=22.926 8, \mu=1 266.931 0, FWHM=18.831 3$ ；扣背景谱的拟合参数为： $A=22.637 8, \mu=1 266.937 1, FWHM=18.607 1$ 。截取扣背景谱的 1 237~1 297 道数据绘图，结果见图 2 中的放大图，图 2 中曲线  $v_4$  为扣背景谱数据， $v_5$  为扣背景谱的高斯拟合曲线。分析可知拟合曲线  $v_5$  与实测曲线  $v_4$  符合良好。

采用解析型改进后的优良指数(Analytic Improved Figure Of Merit, AIFOM)来评价该特征峰拟合效果：

$$AIFOM = \frac{n_p^2}{nA_p^2} \sum_{i=1}^n (y_i - p_i)^2 \quad (10)$$

式中： $n_p$  为拟合峰区所包含的道数； $n$  为本底和峰的道数之和； $A_p$  为全能峰净计数； $y_i$  为第  $i$  道原始谱计数； $p_i$  为函数拟合后的谱计数。拟合效果优劣的判断标准为：如果  $AIFOM < 0.01\%$  时，拟合效果较好； $0.01\% < AIFOM < 0.05\%$  时，拟合效果略差； $AIFOM > 0.05\%$  时，拟合效果差。

根据式(18)选取  $\pm 3\sigma$  为 42Mo 全能峰的边界，计算可得原谱的  $AIFOM=0.03\%$ ，扣背景谱的  $AIFOM=0.02\%$ ，两者拟合效果均较好，扣背景谱的拟合效果更优。

#### 3.2 低含量单能峰拟合

对前述 X 荧光能谱中低含量的 Ag 核素的单能峰，取 1 565~1 655 道的谱数据绘图，见图 3 中  $v_8$ 。分析可知，受背景和放射性统计涨落等因素的影响，Ag 特征峰的数据涨落较大。为此，先对原谱做窗宽为 5， $\sigma=0.25$  的 5 次高斯滤波，再对处理后谱线用 SNIP 算法扣除背景， $v_6$  为背景扣除线，图 4 中  $v_9$  为扣背景谱。分析  $v_8$  和  $v_9$  可知，特征峰计数最大值约位于 1 612 道， $FWHM$  约为 24。因此设  $FWHM$  为 25，分别对  $v_8$  和  $v_9$  采用式(6)做快速高斯函数拟合，得到原谱的拟合高斯参数为： $A=0.790 1, \mu=1 609.808 2, FWHM=28.300 1$ ；扣背景谱的拟合参数为： $A=0.649 0, \mu=1 609.595 8, FWHM=24.274 1$ 。拟合后谱线见图 3 和图 4 中的  $v_7, v_{10}$ 。

原谱的拟合优良指数  $AIFOM=3.69\%$ ，扣背景谱的  $AIFOM=2.01\%$ 。在高背景低含量核能谱拟合中，因原谱

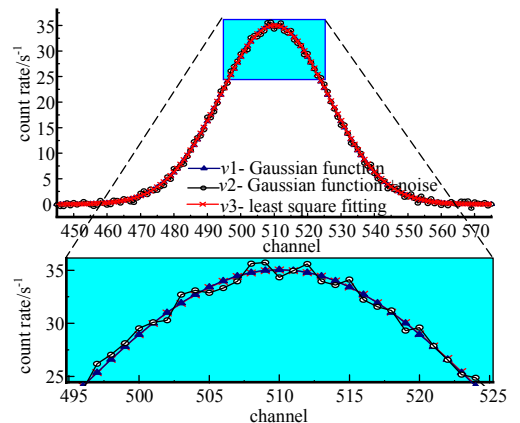


Fig.1 Least square fitting of Gaussian function  
图 1 高斯标准函数最小二乘拟合

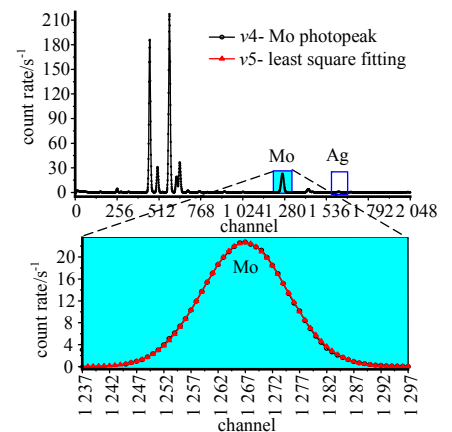


Fig.2 Fitting results of Mo photopeak  
图 2 Mo 单能峰拟合结果

数据统计涨落较大,导致高斯拟合后数据与原谱数据的差值较大,因此,AIFOM 参数不适用于高背景低含量时的拟合效果评价。工程应用发现,在处理高含量单能峰核素时,因计数值远大于背景值,峰形受统计涨落影响相对较小。在此类应用中,背景对拟合结果的影响较小。在处理高背景低含量单能峰时,为减小统计涨落对峰形的影响,高斯拟合前需对数据进行平滑处理,必要时可进行多次平滑。但过度平滑会使峰形展宽,从而影响拟合结果的正确性。因此现场应用中,应根据工程需求合理进行参数调节。实验表明,本文给出的根据实测谱单能峰的窄峰区半高宽读数值来确定拟合窗,进行单能峰高斯函数快速拟合的方法是有效的。

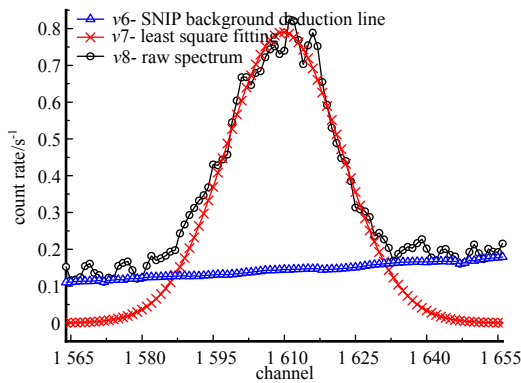


Fig.3 Fitting results of Ag photopeak  
图 3 Ag 单能峰拟合结果

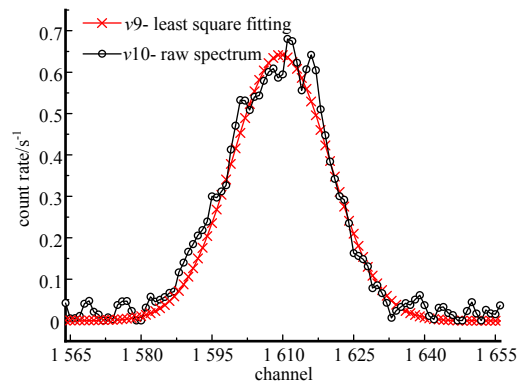


Fig.4 Fitting results of Ag photopeak after eliminating SNIP background  
图 4 扣除 SNIP 背景后的 Ag 单能峰拟合结果

## 4 结论

文中给出了先依据实测谱单能峰的半高宽读数值来选取拟合窗,再运用快速迭代算法进行高斯函数拟合的方法。然后利用该方法对叠加于高斯标准函数的含噪信号进行了实验验证,最后对某矿石实测 X 荧光能谱中的含量较高的 Mo 和低含量的 Ag 核素进行了单能高斯峰拟合实验。实验表明,对于高含量的单能峰,本方法拟合效果良好;对于高背景低含量单能峰,需先进行平滑处理,再进行高斯拟合。综上,本文给出的根据窄峰区数据来进行单能高斯峰快速拟合的方法,避免了传统算法中的大量数据运算,只需利用简洁的迭代运算,即可求得幅值  $A$ 、峰位  $\mu$ 、半高宽 FWHM 参数,进而进行核能谱解析,适用于小型嵌入式能谱处理设备应用。

## 参考文献:

- [1] CARUANA R A,SEARLE R B,HELLER T,et al. Fast algorithm for the resolution of spectra[J]. Analytical Chemistry, 1986,58(6):1162-1167.
- [2] 李敏,盛毅. 高斯拟合算法在光谱建模中的应用研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2008,28(10):2352-2355. (LI Min, SHENG Yi. Study on application of Gaussian fitting algorithm to building model of spectral analysis[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2008,28(10):2352-2355.)
- [3] 钱伟立,徐兰义,陈富裕,等. 高斯函数分解法提取脉搏波特征[J]. 中国生物医学工程学报, 1994,13(1):1-7. (QIAN Weili,XU Lanyi,CHEN Fuyu,et al. Acquiring characteristics of pulse wave by Gauss function separation[J]. Chinese Journal of Biomedical Engineering, 1994,13(1):1-7.)
- [4] 唐冲,惠辉辉. 基于 Matlab 的高斯曲线拟合求解[J]. 计算机与数字工程, 2013,41(8):1262-1263. (TANG Chong,HUI Huihui. Gaussian curve fitting solution based on Matlab[J]. Computer and Digital Engineering, 2013,41(8):1262-1263.)
- [5] 马英杰,周靖,洪旭,等. 核能谱单能峰快速高精度高斯函数拟合算法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2016,36(8):2373-2377. (MA Yingjie,ZHOU Jing,HONG Xu,et al. Study on the high speed and precision Gaussian function fitting algorithm for nuclear single spectral peak[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016,36(8):2373-2377.)
- [6] 孙桂玲,刘波,李维祥,等. 谱图曲线中高斯峰的分离算法与计算机实现[J]. 南开大学学报(自然科学版), 2004,37(4):115-117. (SUN Guiling,LIU Bo,LI Weixiang,et al. Computer realization of Gauss peak separation algorithm in spectrogram curve[J]. Acta Scientiarum Naturalium Universitatis Nankaiensis(Natural Science Edition), 2004,37(4):115-117.)
- [7] 顾民,葛良全. 基于特征函数的 NaI  $\gamma$  能谱高斯峰面积计算[J]. 核技术, 2009,32(11):864-866. (GU Min,GE Liangquan. Gaussian peak area computation of NaI gamma spectrometry based on the eigenfunction[J]. Nuclear Techniques, 2009,32(11):864-866.)
- [8] 赵奉奎. 能量色散型 X 射线荧光光谱仪关键技术研究[D]. 南京:东南大学, 2015. (ZHAO Fengkui. Research on key technologies of energy dispersive X-ray fluorescence spectrometer[D]. Nanjing,China:Southeast University, 2015.)