

5030

ЩЕНИЯ  
ЕННОГО  
ИТИУА  
ЕРНЫХ  
ВАНИЙ



1 - 5030

Л.М. Сорско

ФУРЬЕ-АЛГОРИТМ  
ОБРАБОТКИ СПЕКТРАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИИ  
В ЯДЕРНОЙ ФИЗИКЕ

1970

Сороко Л.М.

1-5030

## Фурье-алгоритм обработки спектральной информации в ядерной физике

Еще никто не видел истинных изображений звезд. Этому мешает атмосфера Земли, а также недостаточные пока размеры объективов астрономических телескопов. Однако интерференционный метод, впервые примененный Майкельсоном, позволил измерить угловые размеры поперечника звезд и таким образом проникнуть сквозь завесу турбулентности атмосферы.

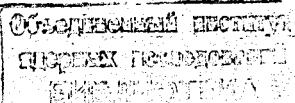
Фурье-алгоритм, которому посвящена данная работа, очень похож на прием Майкельсона. Фурье-алгоритм в ядерной спектроскопии позволяет установить параметры компонент неразрешенных дублетов в условиях, когда сами компоненты сливаются из-за большой ширины кривой разрешения прибора. Приводится общая теория метода обработки спектральной информации с помощью фурье-алгоритма, излагаются полученные результаты и обсуждаются рекомендации, очевидные и неочевидные.

Сообщения Объединенного института ядерных исследований

Дубна, 1970

8342/4.

# ФУРЬЕ-АЛГОРИТМ ОБРАБОТКИ СПЕКТРАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИИ В ЯДЕРНОЙ ФИЗИКЕ



Экспериментально наблюдаемые спектральные распределения отображают истинный спектр всегда в несколько искаженном виде. Спектральные линии размываются, компоненты дублета сливаются. При использовании счетчика частиц, например гамма-квантов, возникают шумы из-за статистических флюктуаций. Все это заставляет экспериментатора обрабатывать исходные данные, с тем чтобы получить относительно "истинную" информацию.

Здесь используются различные методы. На стадии первичной обработки измеренный спектр в виде гистограммы подвергают сглаживанию, удаляют фоновые события. Потом проводят анализ, используя для этого определенную априорную информацию. Это или предположение о числе линий в мультиплете, или допущение о линейчатой структуре спектра, или же другие гипотезы. Подгонку ведут с помощью метода максимума правдоподобия. Выбор наиболее вероятного вида спектра производится на основе статистических критериев согласия. Подобные методы характеризуются тем, что на стадии обработки явно или косвенно используется априорная информация. Кроме этого, всегда оказывается неконтролируемым произвол, связанный с выдвижением тех или иных априорных гипотез.

Кроме таких приемов обработки спектра, существует метод анализа "сырой" спектральной информации, который фактически не нуждается в привлечении какой-либо априорной информации, — это так называемый фурье-алгоритм. С его помощью данные об истинном спектре извлекаются из "сырых" экспериментальных данных наиболее естественным путем.

Фурье-алгоритм стал использоваться в спектроскопии сравнительно недавно. Переломный момент наступил после того, как в системе математического обеспечения электронно-вычислительных машин был разработан алгоритм быстрого преобразования Фурье, позволяющий существенно сократить необходимое машинное время. В наиболее типичных случаях достигается выигрыш в сто раз. Алгоритм быстрого счета можно внедрить без каких-либо затруднений на любой электронно-вычислительной машине. Всюду, где позволяет логика эксперимента, целесообразно ввести предварительную обработку спектра методом алгоритма Фурье и лишь после этого переходить, если потребуется, к подгонке методом максимума правдоподобия.

Обладая одновременно двумя важными достоинствами – отсутствием субъективного произвола и физической простотой – этот алгоритм обработки спектра приобретает все большую популярность. Особым вниманием этот алгоритм пользуется среди тех исследователей, которые повседневно сталкиваются в своей работе с необходимостью быстрой и физически наглядной расшифровки спектров или аналогичных спектральных соотношений.

## 82

Напомним, что преобразованием Фурье называется переход от исходной функции  $f(x)$  к ее фурье-образу, равному, по определению,

$$F(\omega) = \int f(x) e^{-i\omega x} dx. \quad (2.1)$$

Обратное преобразование, при котором совершается переход от фурье-образа  $F(\omega)$  к прообразу, т.е. к исходной функции  $f(x)$ , записывается в виде

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int F(\omega) e^{i\omega x} d\omega; \quad (2.2)$$

Преобразование Фурье является линейной операцией относительно исходной функции и обладает следующими свойствами.

Если функцию  $f(x)$  сдвинуть на величину  $\Delta x$ , то фурье-образ новой функции  $f(x-\Delta x)$  равен

$$\mathcal{F}[f(x-\Delta x)] = \int f(x-\Delta x) e^{-i\omega x} dx = e^{-i\omega \Delta x} \hat{\mathcal{F}}[f(x)]. \quad (2.3)$$

Здесь операторный символ  $\mathcal{F}$  обозначает преобразование Фурье или фурье-образ, т.е. продукт этой операции.

При наблюдении спектров регистрируются всегда чисто действительные величины. Поэтому отрицательные частоты  $\omega < 0$  не несут никакой дополнительной информации и могут быть отброшены. Исходную функцию  $f(x)$  можно характеризовать ее моментами. По определению,  $n$ -ым моментом  $m_n$  функции  $f(x)$  называется величина

$$m_n = \int x^n f(x) dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.4)$$

Нулевой момент  $m_0$  равен среднему значению функции  $f(x)$ , которое принимается здесь равным единице. Момент первого порядка

$$m_1 = \int x f(x) dx \quad (2.5)$$

равен координате центра тяжести сигнала  $f(x)$ , а момент второго порядка определяет дисперсию сигнала или среднеквадратичное отклонение  $\sigma$ . По определению,

$$\sigma^2 = \int (x - x_0)^2 f(x) dx, \quad (2.6)$$

или

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \int x^2 f(x) dx - 2x_0 \int x f(x) dx + x_0^2 \int f(x) dx = \\ &= m_2 - m_1^2, \end{aligned} \quad (2.7)$$

где  $m_1 \equiv x_0$ .

Теорема моментов, связывающая значения производных от фурье-образа  $F(\omega)$  по частоте  $\omega$  при нулевой частоте  $\omega = 0$ , гласит:

$$m_n = \frac{1}{(-i)^n} - \frac{d^n F(0)}{d\omega^n}, n = 0, 1, 2 \dots \quad (2.8)$$

Фурье-образ действительной функции  $f(x)$ , представленный в виде

$$F(\omega) = A(\omega) e^{i\phi(\omega)}, \quad (2.9)$$

обладает следующими свойствами

$$\begin{aligned} A(\omega) &= A(-\omega), \\ \phi(\omega) &= -\phi(-\omega). \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad (2.10)$$

Модуль фурье-образа действительной функции является четной функцией  $\omega$ , а фаза фурье-образа  $\phi(\omega)$  – нечетной функцией  $\omega$ , так что всегда

$$\phi(0) = 0. \quad (2.11)$$

Моменты первых порядков функции  $f(x)$  связаны со значением наклона кривой  $\phi(\omega)$  и кривизной кривой  $A(\omega)$  фурье-образа  $F(\omega)$ . А именно:

$$x_0 = -\frac{d\phi(0)}{d\omega}, = m_1 \quad (2.12)$$

$$m_2 = -\frac{d^2 A(0)}{d\omega^2}; \quad G^2 = m_2 - m_1^2 = -\frac{d^2 A(0)}{d\omega^2} - \left[ \frac{d\phi(0)}{d\omega} \right]^2 \quad (2.13)$$

В силу четности функции  $A(\omega)$  всегда имеем

$$\frac{dA(0)}{d\omega} = 0. \quad (2.14)$$

Основной характеристикой спектрального прибора является кривая разрешения, или функция спектрального окна. Сигнал в форме спектрального окна появляется на выходе спектрометра, если на вход поступает одиночная бесконечно узкая линия. Кривую спектрального окна обозначают через  $g(x)$ . Чтобы обработать "сырой" спектр, требуется в общем случае измерить кривую разрешения  $g(x)$ . Несколько позже станет ясно, что параметры нерасщепленного дублета очень часто можно установить и не зная функцию  $g(x)$ .

Если на вход спектрометра попадает излучение со спектром  $f_0(x)$ , то на его выходе наблюдается сигнал

$$\underline{f(x) = \int f_0(\xi) g(x-\xi) d\xi} \equiv f_0(x) \otimes g(x). \quad (3.1)$$

Любой бесконечно узкий участок спектра возбуждает на выходе сигнал, совпадающий с кривой разрешения  $g(x)$ . Складываясь с весами  $f_0(\xi)$  и испытывая соответствующие сдвиги по  $\xi$ , эти компоненты в сумме образуют сигнал  $f(x)$  (3.1). Интегральная операция (3.1) над двумя функциями  $f_0(x)$  и  $g(x)$  называется сверткой. Наиболее важное свойство операции свертки выражается следующей теоремой.

**Теорема:** фурье-образ  $F(\omega)$  свертки  $f(x)$  двух функций,  $f_0(x)$  и  $g(x)$ , равен произведению фурье-образов  $F_0(\omega)$  и  $G(\omega)$  исходных функций.

**Обратная теорема:** произведению исходных функций  $f_0(x)$  и  $g(x)$  соответствует операция свертки фурье-образов  $F_0(\omega)$  и  $G(\omega)$  этих функций.

**Пример.** Свертка двух функций Гаусса равна функции Гаусса

$$e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}} \otimes e^{-\frac{x^2}{\beta^2}} = \sqrt{\pi} \alpha \beta e^{-\frac{x^2}{\gamma^2}} \quad (3.2)$$

с параметром

$$\gamma^2 = \alpha^2 + \beta^2. \quad (3.3)$$

Следствием теоремы о свертке является соотношение

$$\int \int f_1(x) f_2(x) e^{-i\omega x} dx = \frac{1}{2\pi} \int F_1(\omega - u) F_2(u) du. \quad (3.4)$$

Первый шаг в обработке сложного спектра состоит в переходе от наблюдаемого спектра  $f(E)$  к его фурье-образу

$$F(\omega) = \int f(E) e^{-i\omega E} dE, \quad (4.1)$$

где  $E$  - энергия гамма-кванта,  $\omega$  - "энергетическая" частота. Размерность ее равна  $[E] = \text{радиан}/\text{энергия}$ . В многоканальном анализаторе спектр  $f(E)$  является функцией номера канала. Тогда  $E$  имеет размерность  $[E] = \text{канал}$ , а размерность  $[\omega] = \text{радиан}/\text{канал}$ . С помощью фурье-алгоритма решается задача идентификации линий сложного гамма-спектра, их положения и интенсивности. Полный анализ многоканального спектра с числом каналов  $N = 4096$  и сотнями спектральных линий требует всего около 5 минут машинного времени на ЭВМ типа БЭСМ-6 или CDC-1604-A.

Обработка данных многоканального спектрометра ведется в следующей последовательности:

- ✓ 1) сглаживание спектра с целью устранения случайных флюктуаций,
- 2) вычитание постоянного фона,
- 3) реализация сверхразрешения в разделении тесных дублетов,
- 4) определение положения и интенсивности спектральных линий.

Сглаживание спектра осуществляется с помощью метода, широко распространенного в теории связи для отделения полезного сигнала от шума. Этот метод применим только в том случае, если шум является аддитивным. Совсем другим классом шумов является, например, мультиплексивный шум, вызванный случайными неконтролируемыми вариациями коэффициентов усиления каналов в многоканальном анализаторе.

При наличии аддитивного шума наблюдаемый сигнал  $f(E)$  можно представить как сумму

$$f(E) = s(E) + n(E), \quad (4.2)$$

где  $s(E)$  – истинная спектральная информация, а  $n(E)$  – шум. В гамма-спектрометре шум обусловлен в основном случайными флюктуациями числа отсчетов в канале, а также некоторым средним уровнем помех. Фурье-образ  $F(\omega)$  сигнала  $f(E)$  можно представить в виде

$$F(\omega) = \int f(E) e^{-i\omega E} dE = S(\omega) + N(\omega), \quad (4.3)$$

где  $S(\omega)$  и  $N(\omega)$  – фурье-образы сигналов  $s(E)$  и  $n(E)$ , соответственно.

Определяющим показателем эффективности данного метода устранения шума  $n(E)$  является различие между функциями  $S(\omega)$  и  $N(\omega)$ . Сигнал и шум должны располагаться в различных частотных участках вдоль оси  $\omega$ . В идеальном случае сигнал  $S(\omega)$  и шум  $N(\omega)$  вообще не должны перекрываться в координатах  $\omega$ .

В гамма-спектрометре существует определенное различие между фурье-образами сигналов  $S(\omega)$  и  $N(\omega)$ . Это различие вызвано тем, что каждая спектральная линия заполняет, как правило, несколько каналов анализатора, в результате чего функция  $S(\omega)$  сосредоточена преимущественно в области низких частот  $\omega$ . В противоположность функции  $S(\omega)$ , шум  $N(\omega)$ , вызванный флюктуациями числа сосчитанных гамма-квантов, попавших в один канал, обогашен высокими частотами  $\omega$  в большей степени, чем  $S(\omega)$ .

Исходя из определенных критериев устойчивости ответа, можно выбрать такую фильтрующую функцию  $P(\omega)$ , которая даст сглаженный спектр, очищенный в определенной степени от флюктуирующей компоненты  $n(E)$ . В пределе получаем

$$s(E) \approx \frac{1}{2\pi} \int F(\omega) P(\omega) e^{i\omega E} d\omega. \quad (4.4)$$

Как правило, фильтр  $P(\omega)$  пропускает низкие энергетические частоты  $\omega$  и почти полностью "зарезает" высокие энергетические частоты. Правила выбора оптимальной формы сглаживающего фильтра  $P(\omega)$  еще окончательно не разработаны.

Устранение среднего уровня фона в случае наблюдения линейчатого спектра осуществляют в шкале энергии  $E$  или номера канала. Берут сглаженный спектр и проводят плавную кривую, проходящую через самые глубокие и четкие минимумы сглаженного спектра. Существуют некоторые сравнительно простые критерии проведения этой кривой.

### §5

Идеи о так называемых сверхразрешающих системах всегда вызывали прилив оптимизма у каждого физика-экспериментатора. Однако очень часто подобные предложения, будучи подвергнуты детальному анализу, оказывались миражами либо из-за ошибочности самой идеи, либо из-за невозможности ее реализации. Неудивительно поэтому, что читатель будет испытывать чувство рефлекторной бдительности, когда начнет читать о сверхразрешении. Попытаемся доказать, что речь идет о вполне реальном достижении повышенной разрешающей способности спектрометра при разделении тесных компонент дублета. Сверхразрешение, о котором здесь пойдет речь, по своей природе напоминает сверхразрешение, которого достиг А. Майкельсон в своем звездном интерферометре. Измеряя расположение и контрасты интерференционных полос, А. Майкельсону удалось измерить угловые размеры звезды, несмотря на то, что ни тогда, ни сейчас пока что никому не удалось непосредственно увидеть изображение какой-нибудь звезды в виде диска, какими для нас предстают планеты солнечной системы, наблюдаемые в небольшой телескоп.

Строго говоря, термин "сверхразрешение" отпадает вообще, если с самого начала по-иному сформулировать задачу о разрешении спектральных компонент. Как правило, под разрешающей способностью подразумевают один параметр, характеризующий регистрационную систему, а именно, полуширину кривой разрешения на полувысоте. При этом молчаливо

предполагают, что кривая разрешения принадлежит к одному, вполне определенному классу функций, например, является гауссовой или лоренцевой. Однако на практике кривая разрешения редко имеет такое простое строение, а поэтому ее следует характеризовать существенно большим числом параметров, чем обычно полагают. В частности, важной характеристикой кривой разрешения является степень асимметричности.

Поэтому в самом общем случае требуется знать полностью вид кривой разрешения, если хотят предельно полно обработать "сырые" экспериментальные данные. Более того, кривую разрешения в случае, если она изменяется по спектру, надо измерять во всех его участках. Изменение кривой разрешения органически входит в полную программу экспериментов, которая теперь должна состоять из двух независимых частей: 1) измерение спектра и 2) измерение кривой разрешения в различных участках спектра.

### §6

Выше было сказано, что фурье-образ свертки двух функций равен произведению фурье-образов исходных функций. Преобразовав выражение (3.1), связывающее истинный спектр  $\Gamma_0(E)$ , кривую спектрального разрешения  $g(E)$  и наблюдаемый спектр  $\Gamma(E)$ , получим

$$\text{Ист. Иж.} \\ F(\omega) = F_0(\omega) \cdot G(\omega), \quad (6.1)$$

где  $F(\omega)$  – фурье-образ измеренного спектра,  $F_0(\omega)$  – фурье-образ истинного спектра, а  $G(\omega)$  – фурье-образ кривой разрешения спектрометра.

Измерив в эксперименте функции  $F(\omega)$  и  $G(\omega)$ , можно найти  $F_0(\omega)$ . Задача сводится к легко выполнимой операции деления:

$$F_0(\omega) = \frac{F(\omega)}{G(\omega)}. \quad (6.2)$$

В общем случае функции  $F(\omega)$  и  $G(\omega)$  являются комплекснозначными функциями энергетической частоты  $\omega$ . Из (6.2) видно, что извлечение "чистой" информации о спектре сделано без помощи какой-либо априорной информации и без каких-либо подгоночных операций. Более того, в явном виде здесь не появились также ограничения на разрешающую способность спектрометра в разделении компонент тесного дублета.

Фактически измерения функций  $g(E)$  и  $f(E)$  сопряжены с появлением ошибок измерений. Они-то и определяют истинный предел разрешающей способности. Видно, что разрешающая способность теперь определяется не полушириной кривой разрешения  $g(E)$ , а полным массивом информации о функциях  $g(E)$  и  $f(E)$ . Чем достовернее они измерены, тем более слившиеся компоненты удается обнаружить в спектре.

Резюмируя, можно сказать, что задача нахождения истинного спектра  $f_0(E)$  разрешима после выполнения двух независимых экспериментов. Первый эксперимент заключается в измерении кривой разрешения  $g(E)$ , второй эксперимент - в измерении самого исследуемого спектра. Соотношение между затратами времени на эти два эксперимента выбирается с помощью известных методов планирования эксперимента. В случае, когда кривая разрешения несколько меняется по спектру, затрачиваемые времена измерений будут относиться примерно как 1:1.

Возникает естественный вопрос о том, чем же в сущности определяется предельная разрешающая способность, проявляющаяся наиболее четко при использовании фурье-алгоритма. Для того чтобы найти ответ, разберем реальный пример. На рис. 1 представлена типичная функция  $G(\omega)$ , т.е. фурье-образ кривой разрешения  $g(E)$ . В области низких энергетических частот  $\omega$  функция  $G(\omega)$  отображается довольно плавной кривой. Обычно с увеличением энергетической частоты  $\omega$  функция  $G(\omega)$  уменьшается. Такой монотонный спад продолжается до тех пор, пока не начнут появляться шумы. Это проявляется в случайных выбросах и нерегулярном виде кривой. При еще более высоких энергетических частотах наблюдается медленный спад. Этот участок кривой  $G(\omega)$  не содержит никакой полезной информации. Граница раздела между информационной областью кривой  $G(\omega)$  и безыинформационной областью

находится где-то в изломе кривой, когда крутой спад сменяется на долину. Этот излом расположен при некоторой энергетической частоте  $\omega_{\max}$ . Именно это значение энергетической частоты определяет истинную предельную разрешающую способность. Обычно  $\omega_{\max}$  существенно превышает значение энергетической частоты  $\omega_0$ , которая определяется эффективной полушириной  $\Delta$  кривой разрешения  $g(E)$ . При этом

$$\omega_0 = \frac{\pi}{\Delta}. \quad (6.3)$$

Отношение

$$k = \frac{\omega_{\max}}{\omega_0} \quad (6.4)$$

можно назвать коэффициентом повышения разрешения. Применять термин "сверхразрешение" нет никакой необходимости.

Из сказанного выше следует, что реальная разрешающая способность спектрометра не является какой-то постоянной величиной. Она существенным образом зависит от массива данных, от "статистики", накопленной в ходе измерений кривой  $g(E)$  или  $f(E)$ . По мере накопления "статистики" разрешающая способность монотонно улучшается. Причина такого роста фактической разрешающей способности при неизменной форме кривой разрешения  $g(E)$  обусловлена тем, что по мере увеличения массива данных относительный уровень шумов уменьшается. Одновременно с этим происходит увеличение граничной энергетической частоты  $\omega_{\max}$  при неизменном значении  $\omega_0$ , т.е. полуширины кривой разрешения. Эта закономерность позволяет четко и ясно охарактеризовать возможности, заложенные в конкретном массиве данных, которые получил экспериментатор.

Подобный анализ должен стать неотъемлемой стадией планирования эксперимента. Задача заключается в том, чтобы установить реальное соотношение между величиной  $\omega_{\max}$  и массивом экспериментальных данных, которые используются при расщеплении слившимся компонент дублета, чтобы осуществить планирование эксперимента. Легко видеть, что система

из спектрометра и полученного на нем массива данных достигает своего "потолка" только тогда, когда значение  $\omega_{\max}$  перестает увеличиваться при улучшении статистики.

Отметим еще одно интересное обстоятельство. Как правило, функция  $G(\omega)$  оказывается сравнительно плавной, без особенностей. А это означает, что операция деления функции  $F(\omega)$  на функцию  $G(\omega)$  не может привести к появлению дополнительных особенностей по сравнению с теми, которые имелись в функции  $F(\omega)$ . Именно это свойство позволяет удостовериться в существовании дублета и даже найти энергетическое расщепление, не зная детального поведения функции  $G(\omega)$ .

Процедура деконволюции, т.е. разрешение уравнения типа свертки (3.1) с помощью соотношения (6.2), и есть сам фурье-алгоритм. Видно, что главным эвеном всей задачи становится операция преобразования Фурье.

Все сказанное выше – сравнительно известные вещи, хотя и разбросаны в разных источниках. Методы решения уравнения типа свертки и других соотношений успешно применялись в теории связи и радиолокации. Распространение этих методов на ядерную физику сдерживалось длительное время по чисто техническим причинам. Дело в том, что операция нахождения фурье-образа спектра, когда число каналов достигает 4096, занимает несколько часов машинного времени самых быстродействующих электронно-вычислительных машин. Поэтому фурье-алгоритм был абсолютно недоступен для рядового исследователя.

Появление быстрого алгоритма преобразования Фурье на ЭВМ резко изменило ситуацию, и теперь ничто не мешает быстрому распространению изложенного выше фурье-алгоритма обработки спектральной информации.

## §7

Перейдем к более подробному рассмотрению фурье-алгоритма. Разберем некоторый идеализированный пример, в котором полностью отсутствуют флюктуации, а регистрируемый спектр является непрерывным. Ограничимся анализом наиболее простого случая, когда кривая разрешения

$g(E)$  имеет вид функции Гаусса, а спектр состоит из двух монохроматических линий одинаковых интенсивностей. Наложение двух функций Гаусса при разных значениях расщепления между компонентами дублета имеет вид, показанный на рис. 2. Если расстояние между спектральными компонентами меньше полуширины кривой разрешения, то наблюдатель увидит на спектре только одногорбую кривую.

Пусть задача разрешения двух компонент полностью решена, и мы нашли фурье-образ искомого спектра.

$$F_0(\omega) = \frac{F(\omega)}{G(\omega)}, \quad (7.1)$$

а затем и сам истинный спектр:

$$f_0(E) = \frac{1}{2\pi} \int F_0(\omega) e^{i\omega E} d\omega. \quad (7.2)$$

Первый шаг заключается в нахождении  $F_0(\omega)$  по измеренным функциям  $F(\omega)$  и  $G(\omega)$ . Этот шаг в общем случае является необходимым. Переход от шкалы энергии  $E$  к шкале энергетических частот  $\omega$  дает существенные преимущества. Возникает необычайная острота и удивительная физическая четкость в расшифровке слившихся компонент дублетов. Что касается второго преобразования, осуществляющего обратный переход в шкалу энергии с помощью (7.2), то это преобразование не является необходимым. Его можно совершить только для иллюстративных целей. Новой информации при этом не возникает.

Убедимся в этом на примере двух спектральных компонент дублета разной интенсивности. Функция  $f_0(E)$  имеет вид (рис. 3).

$$f_0(E) = A_1 \delta(E - E_1) + A_2 \delta(E - E_2), \quad (7.3)$$

где  $A_1$  и  $A_2$  — интенсивности компонент, а  $E_1$  и  $E_2$  — значения энергии гамма-квантов. В координатах Фурье получаем

$$\begin{aligned} \frac{F(\omega)}{G(\omega)} &= F_0(\omega) = \int e^{-i\omega E} f_0(E) dE = \\ &\approx A_1 e^{-i\omega E_1} + A_2 e^{-i\omega E_2}. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Абсолютное значение функции  $F_0(\omega)$  имеет минимумы при

$$\omega_{\min} = \frac{(2n-1)\pi}{|E_1 - E_2|}, \quad (7.5)$$

и максимумы при

$$\omega_{\max} = \frac{2n\pi}{|E_1 - E_2|}, \quad (7.6)$$

где  $n$  — целое число.

Из (7.5) и (7.6) видно, что расстояние между соседними максимумами и минимумами определяется величиной-расщепления компонент дублета,  $|E_1 - E_2|$ .

Рассмотрим еще одну характеристику кривой  $F_0(\omega)$ , а именно ее контраст, который в нашем случае (7.4) равен

$$\gamma = \frac{A_2 + A_1}{A_1 - A_2} \quad \text{при } A_1 > A_2. \quad (7.7)$$

Таким образом, все параметры дублета, т.е. расщепление по энергии и соотношение интенсивностей компонент полностью задаются поведением абсолютного значения функции  $F_0(\omega)$ .

Порядок следования слабой и сильной компонент определяется фазовой частью функции  $F_0(\omega)$ . Действительно, если

$$F_0(\omega) = A_0(\omega) e^{i\phi_0(\omega)}, \quad (7.8)$$

то в случае дублета (7.3) имеем

$$F_0(\omega) = A_1 [e^{-i\omega E_1} + \alpha e^{-i\omega E_2}], \quad (7.9)$$

где

$$\alpha = \frac{A_2}{A_1}. \quad (7.10)$$

Принимая условно  $A_1 = 1$ , получаем

$$A_0(\omega) = \sqrt{(1+\alpha^2) + 2\alpha \cos \omega \Delta}, \quad (7.11)$$

$$\phi_0(\omega) = \arctg \left( \frac{\alpha-1}{\alpha+1} \operatorname{tg} \frac{\omega \Delta}{2} \right) - \omega E_{cp}, \quad (7.12)$$

где

$$\Delta = E_1 - E_2, \quad (7.13)$$

$$E_{cp} = \frac{E_1 + E_2}{2}. \quad (7.14)$$

Особенно интересен случай, когда  $\alpha$  весьма близко к единице и порядок следования компонент установить очень трудно. Здесь

$$A_0(\omega; \alpha \approx 1) = 2 \left| \cos \frac{\omega \Delta}{2} \right|, \quad (7.15)$$

$$\phi_0(\omega; \alpha \approx 1) = \frac{\alpha-1}{2} \operatorname{tg} \frac{\omega \Delta}{2} - \omega E_{cp}. \quad (7.16)$$

Производная от функции  $\phi_0(\omega)$  в нуле даст сведения о положении центра тяжести спектрального дублета. В нашем случае в соответствии с (2.12) имеем

$$-\frac{d\phi_0(0; \alpha \approx 1)}{d\omega} = E_{cp} - \frac{\alpha-1}{4} \Delta. \quad (7.17)$$

Еще более сильную зависимость от параметра  $\alpha$  функция  $\phi_0(\omega)$  дает в области минимумов функции  $F_0(\omega)$ , т.е. где

$$\omega_{min} = \frac{(2n-1)\pi}{\Delta}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.18)$$

Достаточно рассмотреть  $n=1$ , так как второй минимум иногда тонет в шумах. Вблизи первого минимума

$$\frac{\omega \Delta}{2} = \frac{\pi}{2} \quad (7.19)$$

$$\lg \frac{\omega \Delta}{2} = +\infty, \quad \Phi = +\frac{\pi}{2}.$$

На рис. 4 приведена зависимость функции  $\Phi(\omega) = |\phi_0(\omega) + \omega E_{\text{ср}}|$  от энергетической частоты  $\omega$ . Видно, что знак величины  $(\alpha - 1)$  качественно сказывается на поведении функции  $\Phi(\omega)$  вблизи минимума. На рис. 4 дан случай  $\alpha > 1$ . Здесь функция  $\Phi(\omega)$  перед минимумом положительна, а после минимума отрицательна. Обратная последовательность наблюдается в случае  $\alpha < 1$ .

Если  $\Lambda_1 = \Lambda_2$ , то функция  $\Phi(\omega)$  тождественно обращается в нуль, а модуль

$$F_0(\omega) = \Lambda_0(\omega) = \left| \cos \frac{\omega \Delta}{2} \right| \quad (7.20)$$

достигает в минимуме значения, равного нулю (рис. 5). Реально наблюдаемая кривая  $F(\omega)$  имеет вид

$$F(\omega) = \left| \cos \frac{\omega \Delta}{2} \right| \cdot \epsilon \sqrt{\pi} e^{-\frac{\omega^2 \epsilon^2}{4}} \quad (7.21)$$

Действительно, исходный спектр, по предположению, регистрируется спектрометром, кривая разрешения которого равна

$$g(E) = e^{-\frac{E^2}{\epsilon^2}}, \quad (7.22)$$

где  $\epsilon$  — параметр гауссовой кривой. Функция  $G(\omega)$  также является гауссовой

$$G(\omega) = \epsilon \sqrt{\frac{\omega^2 \epsilon^2}{4}} e^{-\frac{\omega^2 \epsilon^2}{4}} \quad (7.23)$$

Из (7.21) видно, что положение минимумов функции  $F_0(\omega)$  (7.20) и функции

$$F(\omega) = F_0(\omega)G(\omega)$$

из (7.21) совпадают. Отсюда следует важный вывод: кривая разрешения спектрометра не влияет на положение минимума кривой  $F_0(\omega)$  чистого спектра  $f(E)$ . Этот вывод верен с небольшими оговорками и для общего случая. Сильное влияние функции  $G(\omega)$  сказывается лишь тогда, когда параметр  $\omega_{\min}$  находится по начальной ветви кривой  $A_0(\omega)$ . В реальном эксперименте такой случай встречается редко, и, как правило, параметры дублета определяются по положению минимума кривой  $A_0(\omega)$  или  $F(\omega)$ .

В случае, когда  $A_1 \neq A_2$ , значение функции  $A_0(\omega)$  в минимуме отлично от нуля. Все происходит почти так же, как в классической оптической интерферометрии. Расстояние между спектральными компонентами дублета находится по положению минимумов кривой видимости интерференционных полос, а соотношение между интенсивностями отдельных компонент определяется величиной контраста. Как известно, подобную расшифровку неразрешенных линий оптического спектра впервые осуществил в 1910 г. А. Майкельсон. Современная инфракрасная спектроскопия Фурье, так же, как и метод А. Майкельсона, использует представление Фурье. Современные системы характеризуются весьма высоким разрешением и огромным коэффициентом использования светового потока. В настоящее время строятся инфракрасные спектрометры Фурье с размером собирающего зеркала в 25 метров. Число линий оптического спектра, которое удается расшифровать с помощью таких систем, превысит 250000.

На рис. 6 приведены кривые

$$A_0(\omega) = |A_1 e^{-i\omega E_1} + A_2 e^{-i\omega E_2}| \quad (7.24)$$

для различных расщеплений дублета и относительных интенсивностей:

$$1) \Delta E = \frac{4}{11,8} \epsilon, \quad \alpha = 0,5;$$

$$2) \Delta E = \frac{4}{11,8} \epsilon, \quad \alpha = 0,2;$$

$$3) \Delta E = \frac{6}{11,8} \epsilon, \quad \alpha = 0,3.$$

Проведенные эксперименты с расшифровкой гамма-спектров с помощью фурье-алгоритма показывают, что эффективное разрешение повышается примерно в 20 раз.

Пример расшифровки компонент дублета в гамма-спектре при энергии 724 и 750 кэв показан на рис. 7, 8, 9. Разрешающая способность спектрометра составляла  $\pm 10$  каналов, или  $\pm 34$  кэв. На рис. 7 приведен зарегистрированный спектр  $f(N)$ . На рис. 8 - кривая разрешения  $g(N)$ , измеренная экспериментально при регистрации одиночной гамма-линии. На рис. 9 дана кривая  $A_0(\omega)$ . Наличие ярко выраженного одиночного минимума доказывает существование дублета. Расщепление  $\Delta = (27,3 \pm 2,0)$  кэв. Точность измерения этого расщепления примерно в 20 раз лучше глобальной разрешающей способности спектрометра.

В заключение автор выражает признательность А.А. Тяпкину за полезные высказывания и В.М. Дубовику, предложившему опробовать фурье-алгоритм в задачах расщепления слившихся "резонансов".

### Л и т е р а т у р а

1. T. Inouye, T. Harper and N.C. Rasmussen. Application of Fourier transforms to the analysis of spectral data, *Nucl. Instr. and Meth.*, 67, 125-132 (1969).
2. T. Inouye. The Super Resolution of Gamma-Ray Spectrum, *Nucl. Instr. and Meth.*, 30, 224-228 (1964).
3. T. Inouye, N.C. Rasmussen. A Computer Method for the Analysis of Complex Gamma-Ray Spectra, *Trans. ANS*, 10, No 1, 38-39 (1967).
4. H.P. Yule. Data Convolution and Peak Location, Peak Area, and Peak Energy Measurements in Scintillation Spectrometry, *Annalytical Chemistry*, 38, No 1, 103-105 (1966).

5. A. Savitzky and M.J.E. Golay. Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures, *Analytical Chemistry*, 36, Mo 8, 1627-1 639 (1964).
6. T. Inouye, T. Harper, N.C. Rasmussen. The Application of Fourier Transforms to the Analysis of Spectra Data, *Trans. ANS*, 11, No 1, 415 (1968).
7. J.W. Cooley and J.W. Tukey. An Algorithm for the Machine Calculation of Complex Fourier Series, *Math. Comput.*, 19, No 90, 297-301 (1965).
8. Fast Fourier Analysis. *Scientific American*, 215, No 4, 46 (1966).
9. M.L. Forman. Fast Fourier-Transform Technique and its Application to Fourier-Spectroscopy, *J.O.S.A.*, 56, No 7, 978-979 (1966).
10. W.M. Gentleman and G. Sande. Fast Fourier Transforms for Fun and Profit, 1966 Fall Joint Computer Conference AFIPS Proc., 29, 553-578 (1966).
11. B. Gold and Ch.M. Rader. Effects of Quantization noise in Digital Filters, 1966 Spring Joint Computer Conference AFIPS Proc., 28, 213-219 (1966).
12. T.G. Stokham. High-Speed Convolution and Correlation, Spring Joint Computer Conference, AFIPS Proc., 28, 229-233 (1966).
13. A. Zackor. Application of the Cooley-Tukey Algorithm to Fourier Spectrometry, *J.O.S.A.*, 56, No 10, ii, advert. (1966).
14. G.D. Bergland and H.W. Hale. Digital Real-Time Spectral Analysis, *IEEE Trans*, EC-16, No 2, 180-185 (1967).
15. E.O. Brigham, R.E. Morrow. Fast Fourier Transform, *IEEE Spectrum*, 4, No 12, 63-70 (1967).
16. J. Connes, P. Connes. Methods de Calcul Digital, *J. Phys.*, 28, No 3-4, Suppl., 57 (1967).
17. J.W. Cooley, P.A.W. Lewis and P.D. Welch. Historical Notes on the Fast Fourier Transform. *IEEE AU-15*, No 2, 76-79 (1967).
18. G. Dumermuth and H. Flühler. Some Modern Aspects in Numerical Spectrum Analysis of Multichannel Electroencephalographic Data, *Med and Biol. Engng.*, 5 No 4, 319-331 (1967).

19. M.L. Forman. A Fast Fourier Transform Technique and its Application to Fourier Spectroscopy, *J. Phys.*, 28, No 3-4, Suppl., 58-61 (1967).
20. C.M. Randell. Fast Fourier Transform for Unequal Number of Input and Output Points, *Appl. Opt.*, 6, No 8, 1432-1433 (1967).
21. R.C. Singleton. A Method for Computing the Fast Fourier Transform with Auxiliary Memory, and Limited High-Speed Storage, *IEEE AU-15*, No 2, 91-98 (1967).
22. H. Andrews. A High-Speed Algorithm for the Computer Generation of Fourier Transforms, *IEEE Transactions on Computer*, C-17, No 4, 373-375 (1968).
23. E. Bastida and D. Dotti. Applications and Development of the Fast Fourier Transform Technique. *Alta Frequenza (Italy)*, 37, No 8, 785-788 (1968).
24. M. Bellanger, P. Bonnavaud. Quelques Application de la Transformation de Fourier Rapide, Technique Puissante et Economique de Calcul de Spectres de Fourier Echantillonnes, *L'Onde Electr.*, 48 No 500, 962-972 (1968).
25. G.D. Bergland. A Fast Fourier Transform Algorithm for Real-Valued Series, *Commun. ACM*, 11, No 10, 703-710 (1968).
26. E.O. Brigham, L.B. Lesem, G.E. Ott, J.L. Shanks and T.C. Tillotson. The Fast Fourier Transform: its Applications, *20th Annual Southwestern IEEE Conference Houston, Spec.*, 1-13 (1968).
27. H.L. Buijs. Fast Fourier Transformation of Large Arrays of Data, *Appl. Optics*, 8, No 1, 211-212 (1969).
28. More Merrily (small computer for large fast Fourier analysis), *Electronics*, 42, No 15, 50-52 (1969).
29. R.G. Pridham and R.E. Kowalczyk. Use of FFT Subroutine in Digital Filter Design Program, *Proc. IEEE*, 57 No 1, 106 (1969).
30. D.H. Staelin. Fast Folding Algorithm for Detection of Periodic Pulse Trains, *Proc. IEEE*, 57, No 4, 724-725 (1969).
31. Дж. Э. Хэль. Научные работы А.А. Майкельсона (1852-1931), *Мироведение*, №3, 11-18 (1932).

32. А.А. Забелин. К вопросу об общей теории интерферометров, Труды ГОИ им. С.И. Вавилова, т. XXIV, №2146, 3-12 (1956).
33. Р. Конн. Un Nouveau Type de Spectrometre: l'interferometre à réseaux, Optica Acta, 4, №4, 136-144 (1957).
34. Л. Мерц. Correction of Phase Errors in Interferograms, Appl. Opt., 2, №12, 1332 (1963).
35. П.Ф. Паршин. Аподизация в фурье-спектроскопии. Оптика и спектроскопия, XIII, №5, 740-745 (1962).
36. Шивели. Цифровая машина для получения спектра в реальном масштабе времени. Зарубежная радиоэлектроника, №2, 46-57 (1969).
37. Хаавинд. Вычислительное оборудование, выполняющее преобразование Фурье в реальном масштабе времени. Зарубежная радиоэлектроника, №2, 58-61 (1969).
38. J.E. Hoffman. Real-Time Fourier Spectroscopy, Appl. Opt., 8, №2, 323-327 (1969).
39. N. Jacobi. Resolution and Noise in Fourier Spectroscopy, J.O.S.A., 58, №4, 495-498 (1968).
40. J. Connes and P. Connes. Multiplex Spectroscopy of Planets, Science Journal, 3, №4, 61-63 (1967).
41. R.F. Edgar, B. Lawrenson, J. Ring. An Optical Analogue Fourier Transformer, J. Phys., 28, №3-4, 73-78 (1967).
42. J.L. Flanagan. Spectrum Analysis in Speech Coding. IEEE AU-15, №2, 66-69 (1967).
43. A.A. Michelson. Fourier Transform Spectroscopy (from "Light-waves and their Uses", University of Chicago Press, 1902), Appl. Opt., 6, №4, 692-693 (1967).
44. G.A. Vanasse, H. Sakai. Fourier-Spectroscopy, Progr. in Optics, Ed. E. Wolf, V1, 259-330 (1967).
45. А.А. Майкельсон. Исследования по оптике, Госиздат М.-Л., 1932.
46. L. Mertz. Transformations in Optics, John Wiley, 1965.
47. A. Papoulis. The Fourier Integral and its Applications, Mc Graw, 1962.

48. W.H. Steel. *Interferometry*, Camb. Press. ( 1967).
49. R. Bracewell. *The Fourier Transform and its Applications*, McGraw, 1965.
50. R.C. Jennison. *Fourier Transforms and Convolutions for the Experimentalist*, Pergamon, 1961.

Рукопись поступила в издательский отдел  
6 апреля 1970 года.

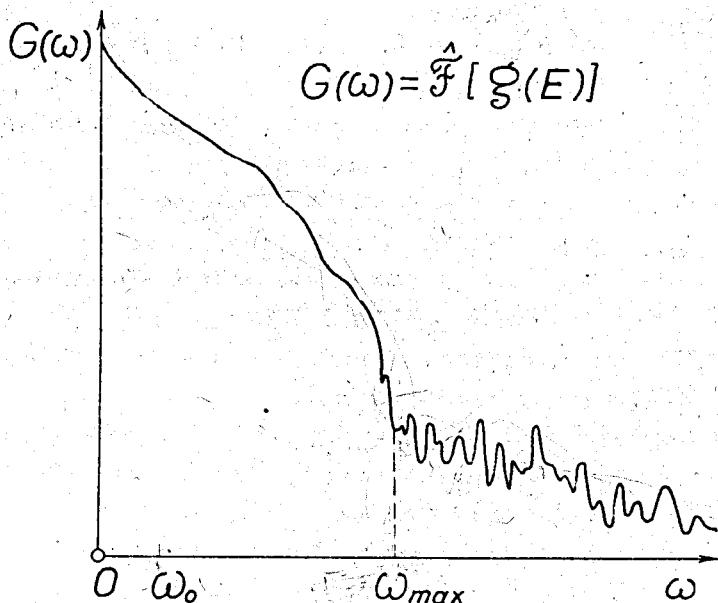


Рис.1. Типичный вид функции  $G(\omega)$ , фурье-образ кривой разрешения  $g(E)$ . Значение энергетической частоты  $\omega_{max}$  разбивает кривую  $G(\omega)$  на информационную и безынформационную области. Величина  $\omega_{max}$  характеризует фактическое разрешение спектрометра в задаче разделения слившихся компонент дублета.

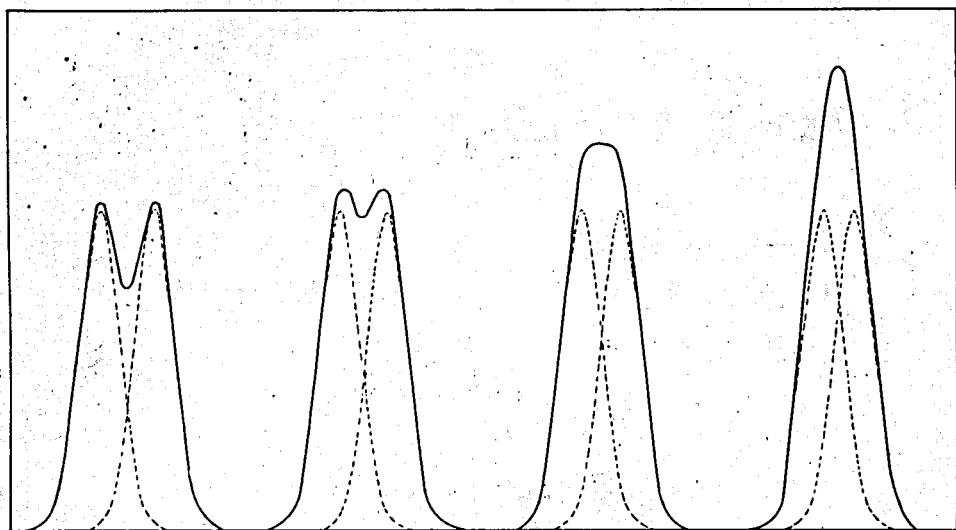


Рис.2. Вид спектра, состоящего из двух тесных монохроматических линий, при наблюдении с помощью спектрометра, кривая разрешения которого имеет вид функции Гаусса.

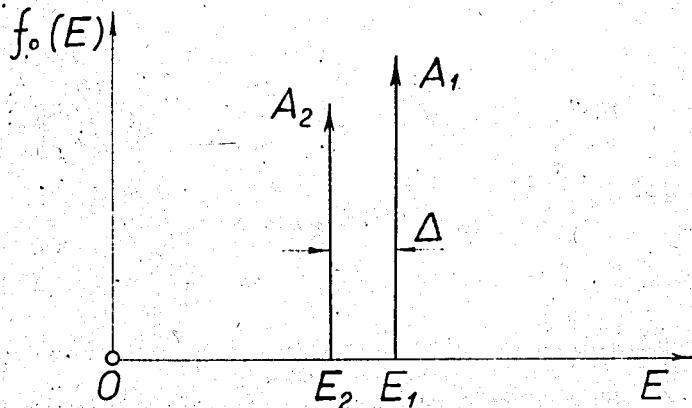


Рис.3. Параметры спектральных компонент дублета разной интенсивности при определенном порядке следования слабой или сильной компоненты.

$$\Phi(\omega) = [\Phi_0(\omega) + \omega E_{cp}]$$

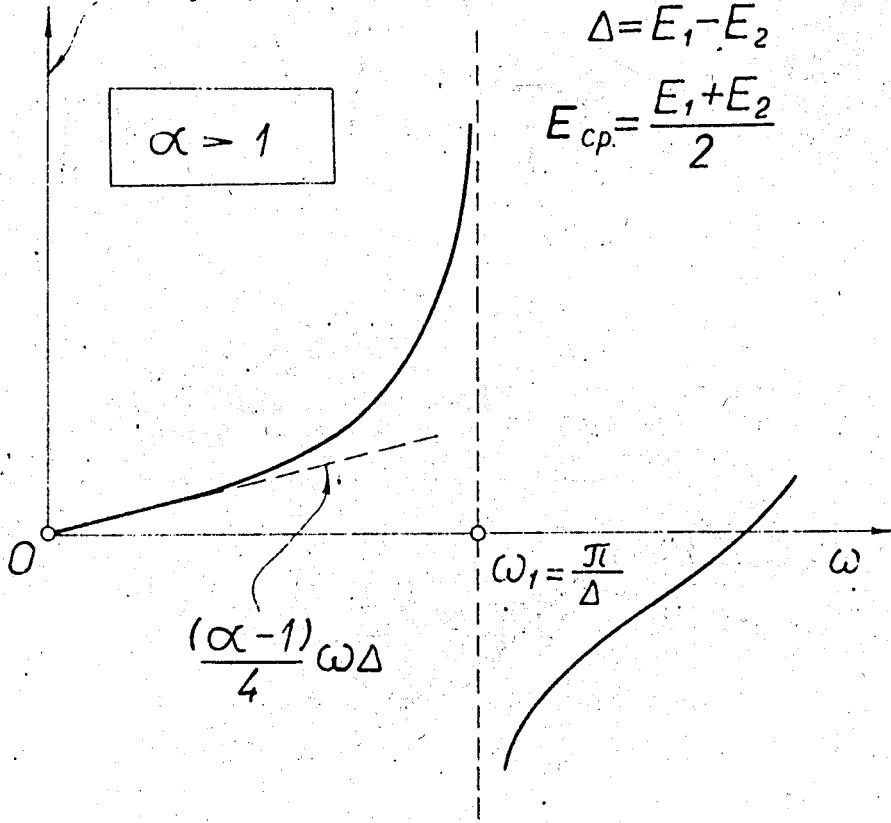


Рис.4. Примерная зависимость фазы  $\Phi(\omega)$  от энергетической частоты  $\omega$  при определенном порядке следования сильной и слабой компонент ( $\alpha > 1$ ).

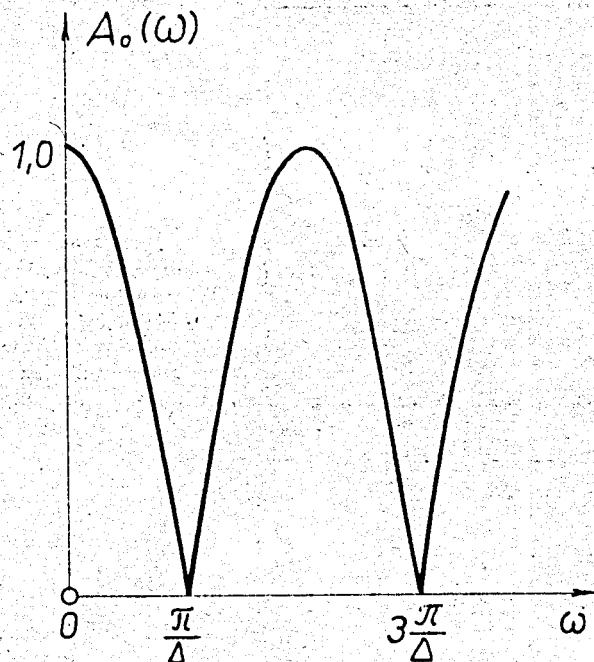


Рис.5. Зависимость модуля  $A_0(\omega)$  от  $\omega$  для компонент с одинаковыми интенсивностями.

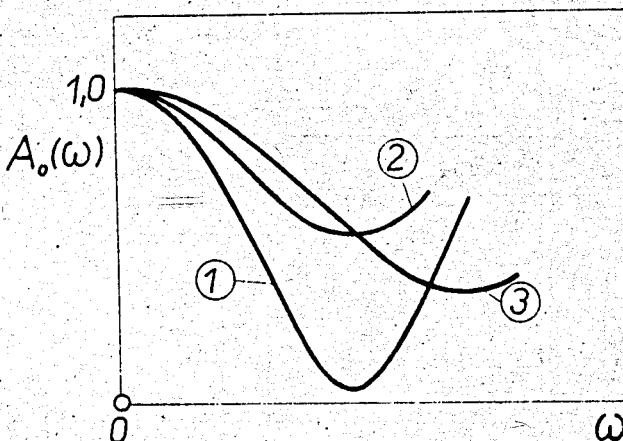


Рис.6. Поведение функции  $A_0(\omega)$  при различных расщеплениях дублета и разных относительных интенсивностях. Порядок следования слабой и сильной компонент дублета по этим данным определить нельзя (см. рис. 4).

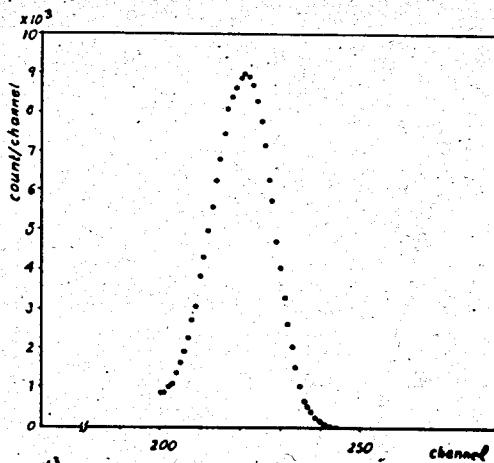


Рис. 7. Пример расшифровки слившегося дублета в спектре гамма-квантов с помощью фурье-алгоритма. На этом рисунке приведен вид спектра, зарегистрированного многоканальным анализатором.

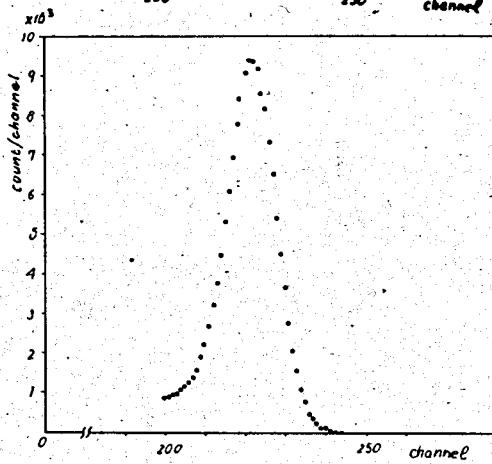


Рис. 8. Вид кривой разрешения спектрометра, полученной при наблюдении монохроматического излучения.

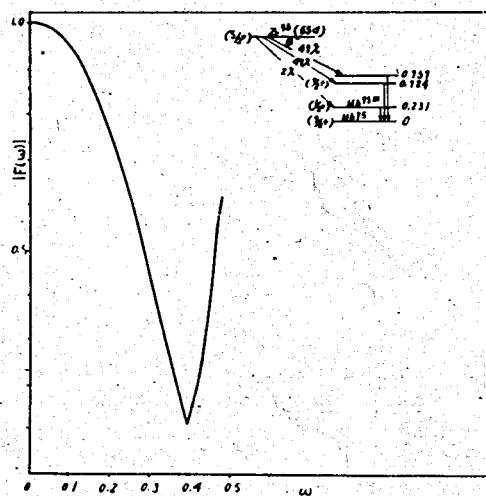


Рис. 9. Вид кривой  $A_0(\omega)$ , вычисленной по данным  $f(N)$  и  $g(N)$  с помощью фурье-алгоритма на ЭВМ. Ярко выраженный одиничный минимум указывает на дублетную структуру излучения. Энергия расщепления определяется положением минимума.