

10-4220

10-4220

Ц 848 + С 344.1Р

3-436



**ЭВМ**

**В ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ**

**ФИЗИКЕ**



1968 г.



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

ЛАБОРАТОРИЯ НЕЙТРОННОЙ ФИЗИКИ

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ И АВТОМАТИЗАЦИИ

10 - 4220

И.Звольски, Ю.Остаевич, В.Приходько

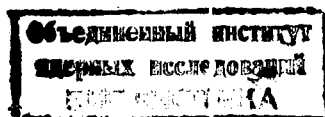
ПРИМЕНЕНИЕ ЭВМ

В СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ЭКСПЕРИМЕНТАХ

ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

Лекция, прочитанная в Школе ОИЯИ по применению электронных  
вычислительных машин в задачах экспериментальной физики

г. Алушта, Крым, СССР, 5-19 мая 1968г.



Дубна 1968

7687/1 нр.

Широкое внедрение электронных вычислительных машин в различные звенья физического эксперимента за последние годы вызвало определенный интерес со стороны физиков-экспериментаторов к вопросам вычислительной техники и программированию. Персонал физических лабораторий при подготовке экспериментов или обработке экспериментальных данных вынужден (в большинстве случаев самостоятельно) осваивать технику ЭВМ и методы работы на вычислительных машинах.

При всем многообразии материала как по самим вычислительным машинам, так и по вопросам программирования, в процессе такой работы возникают естественные трудности, связанные, главным образом, с ограниченностью литературы, рассчитанной на физика-экспериментатора или на лиц, занимающихся развитием методических вопросов экспериментальной физики. Если учесть при этом, что методика использования ЭВМ в экспериментальной физике быстро совершенствуется, то будет понятен интерес со стороны физических институтов к летней школе Объединенного института ядерных исследований - "Применение ЭВМ в задачах экспериментальной физики".

Школа проводилась Лабораторией вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ (директор - член-корреспондент АН СССР проф. М.Г.Мешеряков) в г.Алуште (Крым) с 5 по 19 мая 1968 года.

Программа школы наряду с основополагающими вопросами включала также лекции по некоторым конкретным современным методикам. Для чтения лекций были приглашены ведущие специалисты из Объединенного института ядерных исследований, институтов стран-участниц ОИЯИ, а также коллеги из европейских исследовательских центров - ЦЕРНа (Швейцария) и Сакле (Франция).

Не имея возможности опубликовать весь материал, ректорат Школы подготовил к изданию отдельные лекции, сохранив, в основном, их в том виде, в котором они были представлены авторами.

Лиц, интересующихся лекциями в полном объеме, мы адресуем в библиотеку ОИЯИ, где находится полный сборник прочитанных в школе лекций: "Применение ЭВМ в задачах экспериментальной физики".

Ректор Школы  
доктор технических наук

Г.ЗАБИЯКИН

Отпечатано методом ксерокс-ротатронт с материалов, подготовленных ректоратом Школы.

## I. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О ЯДЕРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И ВОЗМОЖНЫЕ ПРИМЕНЕНИЯ ЭВМ.

Под ядерной спектроскопией в настоящее время обычно понимают часть ядерной физики, которая изучает разрядку нестабильных состояний ядер (основных или возбужденных с энергией возбуждения, как правило, меньше энергии связи нуклона) независимо от пути возникновения этих состояний.

Целью ядерной спектроскопии являются:

- 1) получение сведений о путях разрядки таких состояний и вероятностях этих превращений;
- 2) определение спектра возможных энергетических состояний изучаемого ядра и их характеристик (время жизни, энергии, спина, чётности, электрического и магнитного моментов и т.д.);
- 3) на основе этой информации — заключение о внутренней структуре ядра в его конкретных энергетических состояниях и получение сведений о характере физических закономерностей, которым подчиняются отдельные типы разрядки нестабильных состояний.

## 1. Радиоактивное излучение - источник информации о свойствах ядра.

Для ядерной спектроскопии основная информация о ядре заключена в спектре электронов, позитронов, альфа-частиц, гамма-квантов и т.д., испускаемых ядрами. В зависимости от конкретной задачи изучаются:

1. Распределение количества испускаемых частиц в зависимости от их энергии (энергетическое распределение).

2. Изменение количества испускаемых частиц во времени (временное распределение).

3. Распределение количества испускаемых частиц в зависимости от угла вылета по отношению к выделенному направлению. При этом нас могут интересовать распределения в зависимости от одного параметра (одномерная задача) или в зависимости от нескольких параметров одновременно (многомерные задачи).

### 2. Энергетическое распределение излучения.

Так как ядро является квантовомеханической связанной системой нуклонов, спектр его возбужденных энергетических состояний - дискретный. При переходе такой системы из одного состояния в другое освобождается точно определенная энергия. Если она уносится одной частицей, то энергетический спектр вылетающих частиц имеет дискретный характер (линейный спектр), если при переходе возникает две или больше частиц, то их энергетическое распределение носит сплошную форму.

Энергии монохроматических излучений и граничные энергии сплошных спектров определяют разность энергетических состояний ядра. Относительные интенсивности отдельных компонент излучений сильно зависят, кроме всего прочего, от таких характеристик состояний, как спин и его проекция, чётность, внутренняя конфигурация нуклонов и т.д. Так, например, отношение числа конверсионных электронов и гамма-квантов, возникающих при переходах между двумя состояниями одного сорта ядер, определяют мультипольность электромагнитного перехода, которая, в свою очередь, связана правилами отбора с квантовыми характеристиками обоих состояний.

Распределение количества частиц от времени вылета даёт сведения об абсолютных вероятностях переходов, зависящих, кроме энергии и квантовых характеристик, и от внутренней структуры состояний. Таким образом можно судить, например, о коллективизации состояния ядра или о дополнительных запретах, не учтенных теорией.

Форма угловых распределений частиц или гамма-квантов зависит от спинов состояний и углового момента, уносимого вылетающими частицами или гамма-квантами (мультипольности). Изменение угловых распределений под воздействием магнитного поля на излучение ядра даёт нам сведения о ядерных магнитных моментах.

### 3. Спектрометры и полученные с их помощью спектры распределений.

#### 3.1. Сортировка по энергии.

Почти во всех опытах в ядерной спектроскопии необходимо в первую очередь установить распределение частиц по энергии. Устройства, способные зарегистрировать (детектировать) и одновременно провести сортировку частиц или гамма-квантов по энергии, называются спектрометрами.

Для установления энергетического распределения используются разные аспекты взаимодействия излучений с веществом или полями. Так, например, в магнитных спектрометрах для сортировки заряженных частиц используются анализирующие и фокусирующие свойства (магнитных) полей. В других типах спектрометров для определения энергии используется то обстоятельство, что энергия, переданная частицей детектору, пропорциональна амплитуде электрического импульса, появляющегося на выходе детектора (сцинтилляционные и полупроводниковые детекторы, пропорциональные счетчики). Таким образом, энергетический спектр излучения преобразуется в спектр амплитуд импульсов, которые, в свою очередь, подвергаются анализу с помощью электронных устройств.

Спектр, снятый с помощью спектрометра, является всегда искаженным изображением энергетического распределения самого излучения. Это результат влияния: 1) характера физических процессов, которые используются для анализа, 2) качества анализирующей части спектрометра и 3) несовершенства электронной аппаратуры, передающей информацию от детектора в запоминающее устройство.

Рассмотрим некоторые конкретные примеры спектров. Моноэнергетическим группам заряженных частиц в спектре соответствуют линии. Ширина линии на половине её высоты характеризует одно из важнейших свойств спектрометра - разрешающую способность. Положение линии на оси абсцисс определяет энергию частиц, площадь под линией - их количество. В этом случае полученный спектр является наиболее близким изображением истинного энергетического распределения излучения.

Более сложную форму имеют спектры гамма-лучей, полученные с помощью сцинтилляционных или полупроводниковых спектрометров,



в которых амплитудные спектры моноэнергетических групп гамма-квантов содержат, кроме линий, и сплошные распределения амплитуд. Характер спектра определен способами взаимодействия гамма-лучей с веществом детектора, а именно: фотоэлектрическим поглощением, комптоновским рассеянием и образованием пар электрон-позитрон (для  $E > 1022$  кэв). В случае образования пары позитрон аннигилирует, и аннигиляционные гамма-кванты или покидают детектор, или испытывают некоторые из первых двух взаимодействий. Во всех этих случаях образуются соответствующие электроны или позитроны с определенной кинетической энергией, которая передается детектору, и амплитудный спектр дополняется их энергетическим распределением. На рис. I изображено теоретическое энергетическое распределение фотоэлектронов и комптоновских электронов от фотонов с энергией 511 кэв, а также амплитудные спектры, полученные с сцинтилляционным и  $Ge(Li)$  - детекторами.

Отступление реальной формы амплитудного спектра от теоретического распределения электронов по энергии связано:

- 1) с конечной разрешающей способностью спектрометров;
- 2) с эффектом многократных процессов взаимодействия гамма-квантов с веществом детектора и
- 3) с регистрацией гамма-лучей, рассеянных обратно от материала, окружающего детектор (пик обратного рассеяния).

Энергия моноэнергетической группы гамма-квантов определяется в амплитудном спектре по положению пика полного поглощения или пиков вылета аннигиляционного излучения, интенсивность — из площади под линией, с учетом эффективности детектора.



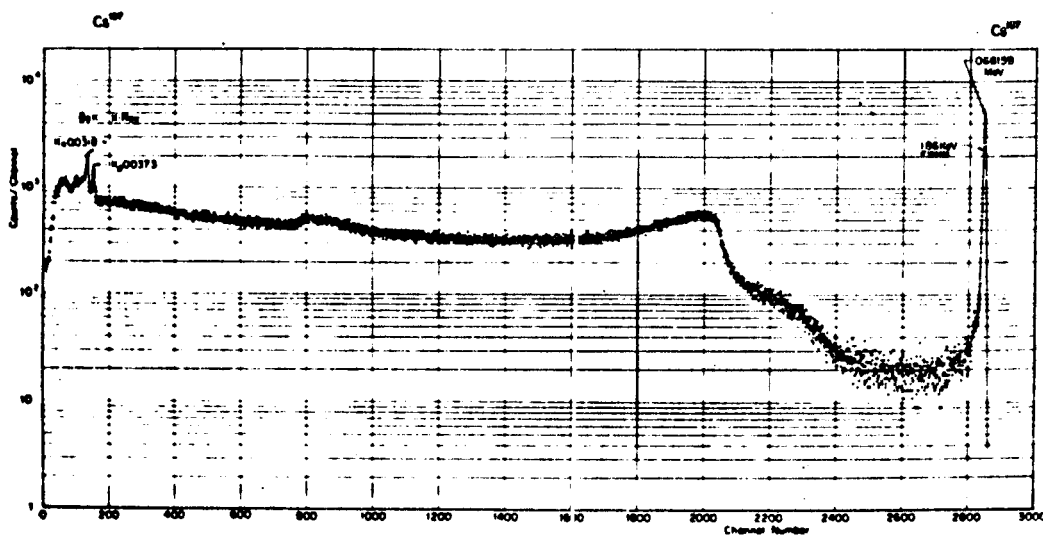
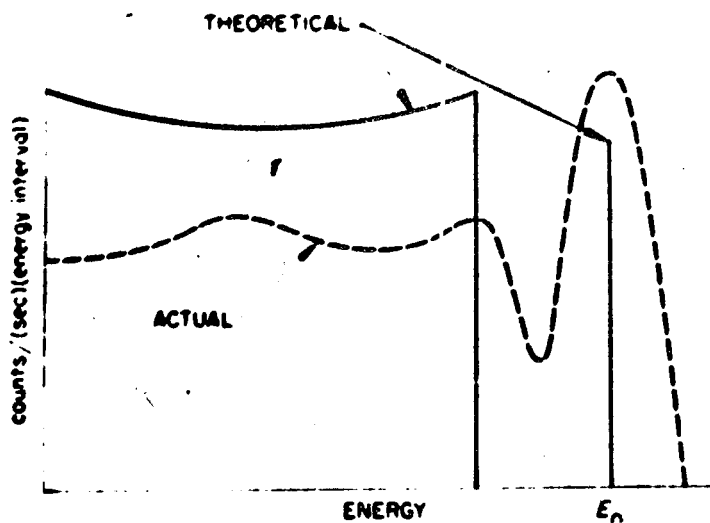


Рис. I Теоретическое распределение фотоэлектронов и комптоновских электронов в кристалле  $\text{NaI}$  ( $3'' \times 3''$ ) от гамма-квантов с энергией 511 кэв (кривая "а") и соответствующее амплитудное распределение, полученное с кристаллом  $\text{NaI}(\text{Te})$  (кривая "б"). В нижней части рис. I - амплитудный спектр гамма-излучения с энергией 661 кэв, полученный с  $\text{Ge}(\text{Li})$ -детектором ( $2,5 \text{ см}^2 \times 4 \text{ мм}$ ).

### 3.2. Корреляции частиц по времени. Временные спектры и спектры совпадений.

В ядерной спектроскопии часто встречаются задачи, требующие установить, между какими частицами существуют временно корреляции, и установить распределения частиц в зависимости от времени (временные спектры). Установление временных корреляций дает нам сведения о генетической связи между отдельными частицами, и тем самым о генетической связи переходов, в которых эти частицы возникают. Временные распределения количества испускаемых частиц дают информацию об абсолютных вероятностях переходов.

Отбор коррелированных по времени событий (например, "одновременное" появление двух или нескольких частиц) осуществляется обычно с помощью спектрометров совпадений. В этих установках проводится анализ не только по времени, но и по энергиям. В результате измерений получаются спектры совпадений.

При изучении временных корреляций получают зависимость скорости счета совпадений от многих параметров: времени корреляции и энергий (амплитуд), совпадающих по времени частиц (гамма-квантов). На опыте можно изучать одновременно зависимость скорости счета совпадений от всех параметров или фиксировать некоторые параметры в определенных пределах. В зависимости от этого полученные спектры являются одно- или многомерными.

### 4. Логическая схема спектрометрического тракта.

В общем виде последовательность операций, выполняемых при спектрометрических измерениях, может быть представлена в виде следующей логической схемы /I/ (рис.2). Детектор (детекторы) регистрирует частицы, либо побочные продукты ядерной реакции.



На выходе детектора при каждом акте регистрации появляются электрические сигналы, параметры которых вместе с некоторыми дополнительными условиями характеризуют исследуемый процесс.

В схемах детекторной электроники происходит усиление и формирование сигналов, а также предварительный отбор событий, удовлетворяющих определенным условиям отбора. В схемах аналого-цифрового преобразования регистрируемый параметр (амплитуда, время, пространственная координата и т.д.) преобразуется в цифровой код.

При регистрации кодов в памяти возможно использование как интегрирующего, так и неинтегрирующего режимов. В первом случае каждому каналу измеряемого спектра соответствует определенная ячейка памяти. Адрес ячейки задается кодом регистрируемого события. При неинтегрирующем режиме код каждого события записывается индивидуально во временной последовательности в долговременное запоминающее устройство (например, на магнитную ленту).

Следует отметить, что, наряду с общими тенденциями повышения точности и скорости при проведении амплитудных и временных измерений, в ядерной спектроскопии все шире используются комплексные спектрометрические измерения с одновременной регистрацией нескольких параметров исследуемого явления. При многомерном анализе требуется не только получить закон распределения изучаемых параметров, но и установить взаимосвязь этих параметров между собой. В этом случае спектральное распределение изучаемого явления описывается не кривой на плоскости, а поверхностью в многомерном пространстве.

Основным затруднением при многомерных измерениях является проблема большой памяти регистрирующего устройства, поскольку

В общем случае число ячеек памяти должно быть равно произведению числа каналов по каждому из измеряемых параметров. Наличие больших потоков информации довольно часто приводит к острой постановке вопроса о сокращении её объема, так как из всех поступающих событий в большинстве случаев лишь 10-20% несут в себе полезную информацию. Такие вопросы возникают как в ходе эксперимента, так и при обработке накопленной информации.

Именно эти трудности обусловили развитие ряда новых методических приемов многомерной спектрометрии, к числу которых в первую очередь следует отнести методы выборочной регистрации. Одним из таких методов является метод "цифровых окон", в котором код каждого поступающего события сравнивается с кодами границ участков спектра, подлежащих регистрации. В память записываются лишь те события, коды которых принадлежат заданным "окнам".

Для ряда задач, в особенности при измерении спектров с резко выраженными пиками, используется другой метод выборочной регистрации. Ассоциативный метод предполагает запись в памяти как кода, характеризующего измеряемую величину, так и число событий с данным кодом. После заполнения всех ячеек памяти составляется "список" дескрипторов, по которым ведется дальнейшая регистрация. Таким образом, в основном регистрируются события, имеющие большую частоту появления, т.е. более вероятные. Во многих случаях именно эти события содержат максимум полезной информации.

В многомерных измерениях одним из основных остается метод прямой регистрации событий с записью на магнитную ленту. После окончания эксперимента производится считывание и поканальная сортировка кодов в памяти интегрирующего типа,

при этом используются в основном выборочные методы.

Применение ЭВМ на этапе накопления информации связано в большинстве случаев именно с многомерными экспериментами. При этом преимущество ЭВМ перед анализаторами с фиксированной программой работы (особенно в режимах выборочной регистрации) состоит не только в возможности использования сколь угодно сложных алгоритмов накопления информации, но и в наличии практически неограниченного набора программ и возможности их быстрой смены, что в принципе позволяет проводить измерения в любой экспериментальной ситуации.

Использование ЭВМ в задачах регистрации спектрометрической информации может быть как прямым (накопление ведется непосредственно в памяти машины /2,4/, так и косвенным. В последнем случае ЭВМ применяется лишь в начальной стадии эксперимента для формирования списка дескрипторов и для задания границ участков спектра, подлежащих регистрации /3/. Эта дополнительная информация переносится затем в любое МОЗУ, где и ведется последующая регистрация.

Накоплением информации в памяти завершается этап регистрации данных. Следующим шагом является обработка спектрометрической информации (рис.2).

### 5. Обработка спектров.

Выше было отмечено, что спектр, полученный в процессе измерения, всегда является искаженным изображением первичного распределения излучения по параметрам. Восстановление этого первичного распределения является целью обработки спектров.

В зависимости от типа задачи и постановки опыта процесс обработки может быть разбит на предварительный и окончательный этапы. Это разделение зависит в каждом конкретном случае от многих обстоятельств, к числу которых, в первую очередь, следует отнести: 1) характер и объем обрабатываемой информации; 2) параметры имеющейся ЭВМ; 3) цель обработки: (а) количественный контроль хода эксперимента; б) подготовка данных для обработки на другой ЭВМ; в) обработка для определения искомых физических величин).

Поэтому представляется более общим и удобным разделение процесса обработки на отдельные этапы на основе логической последовательности их выполнения. Эта последовательность может быть представлена следующей схемой:

- 1) сжатие и преобразование информации;
- 2) коррекция;
- 3) предварительная обработка;
- 4) окончательная обработка.

Методы сжатия и коррекции информации выделены как самостоятельные этапы, поскольку в большинстве случаев эти операции выполняются непосредственно в регистрирующем тракте.

В операциях предварительной обработки спектрометрическая информация корректируется с целью избавления спектра от влияний посторонних эффектов, искажающих закономерности распределения излучений. Одновременно информация приводится к виду, наиболее удобному для извлечения физических результатов. На предварительном этапе обработки осуществляется также переход от "рабочей" шкалы (например, амплитуда, номер канала) к шкале параметра распределения (энергия, время) и выбирается наиболее удобная



система координат, в которой распределение имеет самую простую форму. Кроме того, результаты предварительной обработки используются для количественной оценки достоверности накопленных данных и последующего введения управляющих обратных связей (контроль детекторной аппаратуры, изменение условий сбора, управление спектрометром и т.д. (рис.2) ).

Задачей окончательной обработки является извлечение сравнительно малого количества числовых характеристик исходного спектра, имеющих, как правило, вполне определенный физический смысл и носящих более общий характер, чем распределение числа отсчетов по каналам, найденное в одном измерении.

В математическом выражении данная задача сводится к разложению спектров на отдельные компоненты и определению тех параметров, через которые выражаются закономерности исследуемых физических процессов.

Все этапы обработки могут быть объединены единой организующей программой, позволяющей обращаться к любой из подпрограмм, имеющихся в общей программе обработки данного типа спектров.

## П. НЕКОТОРЫЕ МЕТОДЫ КОРРЕКЦИИ И ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ.

### Г. Методы сжатия информации.

В настоящее время основными методами сокращения объема экспериментальной информации являются рассмотренные выше методы выборочной регистрации (ассоциативный, методы цифровых

и аналоговых "окон" и др.<sup>ж</sup>), а также методы предварительной обработки информации в аналоговой форме /5/. Кратко остановимся на некоторых особенностях, связанных с применением указанных методов.

1.1. Основным недостатком ассоциативного метода является потеря части рабочего объема памяти, используемой для хранения дескрипторов, и сравнительно малая эффективность регистрации событий. Кроме того, во многих экспериментах более интересными являются слабые эффекты, измерение которых ассоциативным способом затруднено. Правда, применение ЭВМ для ассоциативного накопления информации несколько облегчает задачу, так как в этом случае допустимо использование сколь угодно сложных алгоритмов составления списков дескрипторов для последующей регистрации. Но трудность как раз и заключается в нахождении подходящих алгоритмов, поэтому для некоторых задач этот метод в чистом виде оказывается практически неприемлемым.

1.2 Метод аналоговых и цифровых "окон", в принципе, применим для любых измерений, однако при его использовании необходимо предварительно знать спектр исследуемого явления, что не всегда возможно.

К недостаткам выборочных методов регистрации следует отнести также сравнительно небольшую скорость регистрации событий, особенно при большом числе дескрипторов (или "окон"), т.к.

ж) В работе /6/ описан гибридный метод, представляющий собой комбинацию ассоциативного метода и метода цифровых "окон". В данном методе для регистрации каждого пика отводится определенная зона, признаком которой является всего лишь один дескриптор. Распределение отсчетов по каналам производится так же, как и для обычного анализатора.

в этих случаях операции сравнения кодов занимают много времени. Повышение быстродействия может быть достигнуто либо применением больших буферных устройств памяти, либо разработкой специальных программ поиска тождественных кодов.

Кроме того, при обработке спектров (особенно многомерных) часто возникают трудности при определении характера фона в "окне", установления истинности совпадений и др., т.к. для однозначного решения этих вопросов желательно иметь весь спектр. Многие авторы /7,8/ считают, что вообще лучше иметь всю информацию, а её отбор вести в процессе обработки.

Тем не менее выборочные методы регистрации находят широкое применение в различных областях экспериментальной ядерной физики, а развитие этих методов происходит все более интенсивно.

1.3. Метод предварительной аналоговой обработки информации сводится по существу к простейшим арифметическим операциям над детекторными импульсами (сложение амплитуд, определение отношения амплитуд двух импульсов, отбор совпадений и т.д.) и во многих случаях позволяет значительно сократить объем необходимой памяти без каких-либо потерь информации, характеризующей физический процесс. Единственным недостатком данного метода является ограниченная точность, с которой производятся операции в аналоговой форме.

1.4. Кроме описанных выше методов, в ряде работ имеется описание "скрытых" методов сжатия объема экспериментальной информации. В работе /9/ показано, что при измерениях спектров, полученных в спектрометрах с полупроводниковыми детекторами, необходимое число каналов может быть уменьшено в 1,5 + 2 раза. В этих методах используется то обстоятельство, что для  $Ge(Li)$ -детекторов разрешение ухудшается с увеличением энергии регистрируемой

частицы и, таким образом, имеется принципиальная возможность сокращения числа каналов, необходимых для измерения спектра в определенном энергетическом диапазоне. Это достигается применением нелинейной шкалы в аналого-цифровых преобразователях.

## 2. Коррекция дрейфов "нуля" и коэффициента усиления спектрометров.

Основная трудность при проведении точных измерений амплитудных спектров связана с тем, что "нуль" (порог) и коэффициент усиления спектрометра недостаточно стабильны.

Изменения "нуля" приводят к соответствующим сдвигам всей спектральной картины, а изменения коэффициента усиления выражаются в смещении отдельных спектральных деталей в прямой пропорции по отношению к положению рассматриваемой особенности спектра. Для компенсации дрейфов обычно используются системы стабилизации, в которых "нуль" и коэффициент усиления спектрометра автоматически подстраиваются по специальным реперным линиям.

Другое направление в точной спектрометрии связано с применением ЭВМ для коррекции дрейфов "нуля" и коэффициента усиления спектрометрических устройств /II-15/. В этих методах коды, характеризующие номер канала поступающего события, записываются индивидуально во временной последовательности в запоминающем устройстве (например, на магнитную ленту). Вычислительная машина после окончания эксперимента "просматривает" в той же последовательности содержимое запоминающего устройства и, делая простейшие вычисления в каждом коде, корректирует "нуль" и коэффициент усиления спектрометра по двум реперам, в качестве которых могут использоваться специфические пики в исследуемом

спектре, либо пики в спектре от стороннего источника, а также электрические импульсы или световые вспышки от специальных генераторов.

Сущность метода, предложенного в работе /II/, состоит в следующем. В программу вычислений вводятся положения двух соседних "окон" на склонах реперных пиков, принадлежащих исследуемому спектру. Код каждого события корректируется по формуле

$$N_i' = (N_i + \rho_i) (K_i + 1), \quad (\text{II} - \text{I})$$

где  $N_i'$  - код события  $N_i$ , скорректированного на уход "нуля" и усиления;  $\rho_i$  - величина коррекции "нуля" (в каналах) и  $K_i$  - величина коррекции коэффициента усиления.

Если  $N_i'$  принадлежит одному из "окон", то в зависимости от координаты "окна" величины  $\rho_i$  или  $K_i$  получают определенные приращения. Знак приращения зависит от положения "окна" на склонах реперного пика. Одновременно с коррекцией производится поканальная сортировка кодов.

В работе /15/ применен метод коррекции спектров по электрическим реперным импульсам. В данном методе два эталонных импульса от стабильного генератора непрерывно подаются на вход предусилителя вместе с детекторными импульсами, измеряются амплитудным кодировщиком и регистрируются в памяти.

Если в процессе измерений спектрометрический тракт стабилен, то эталонные импульсы имеют одни и те же коды (пусть, например, код малого эталонного импульса, корректирующего "нуль", равен  $N_{0p}$ , а большого эталонного импульса, корректирующего коэффициент усиления, равен  $N_{0y}$ ).

При изменении "нуля" на некоторую величину  $\Delta\rho$  и коэффициента усиления на  $\Delta K$ , измеренные коды эталонных импульсов будут равны

$$\left. \begin{aligned} N_{pиз} &= (N_{op} + N_0)x + y - N_0 \\ N_{yиз} &= (N_{oy} + N_0)x + y - N_0 \end{aligned} \right\}, \quad (\text{II} - 2)$$

где  $x = 1 \pm \Delta K$  ;  $y = \pm \Delta\rho$ ;  $N_0$  - код, соответствующий порогу амплитудного анализатора; знак перед  $\Delta K$  и  $\Delta\rho$  указывает направление сдвига "нуля" и коэффициента усиления.

Истинное значение кода произвольного события может быть представлено в виде:

$$N_i' = (N_{iиз} + N_0 - y) \frac{1}{x} - N_0. \quad (\text{II} - 3)$$

Решая совместно (2) и (3), получим скорректированный код события

$$N_i' = (N_{iиз} - N_{pиз}) \frac{N_{oy} - N_{op}}{N_{yиз} - N_{pиз}} + N_{op}. \quad (\text{II} - 4)$$

На рис.3 приведены искаженный (а) и скорректированный на уход "нуля" и коэффициента усиления (б)  $\gamma$ - спектры  $^{60}\text{Co}$ .

В настоящее время практически все прецизионные амплитудные анализаторы имеют системы стабилизации "нуля" и коэффициента усиления. Методы коррекции на ЭИМ применяются лишь в тех случаях, когда в измерениях по той или иной причине используется неинтегрирующий режим работы памяти (многомерные анализаторы с магнитной лентой) /13/, когда требуется более высокая точность измерений /11/, и, наконец, когда применение систем стабилизации затруднительно (например, при обработке спектрограмм, полученных в магнитных  $\beta$  - спектрометрах).

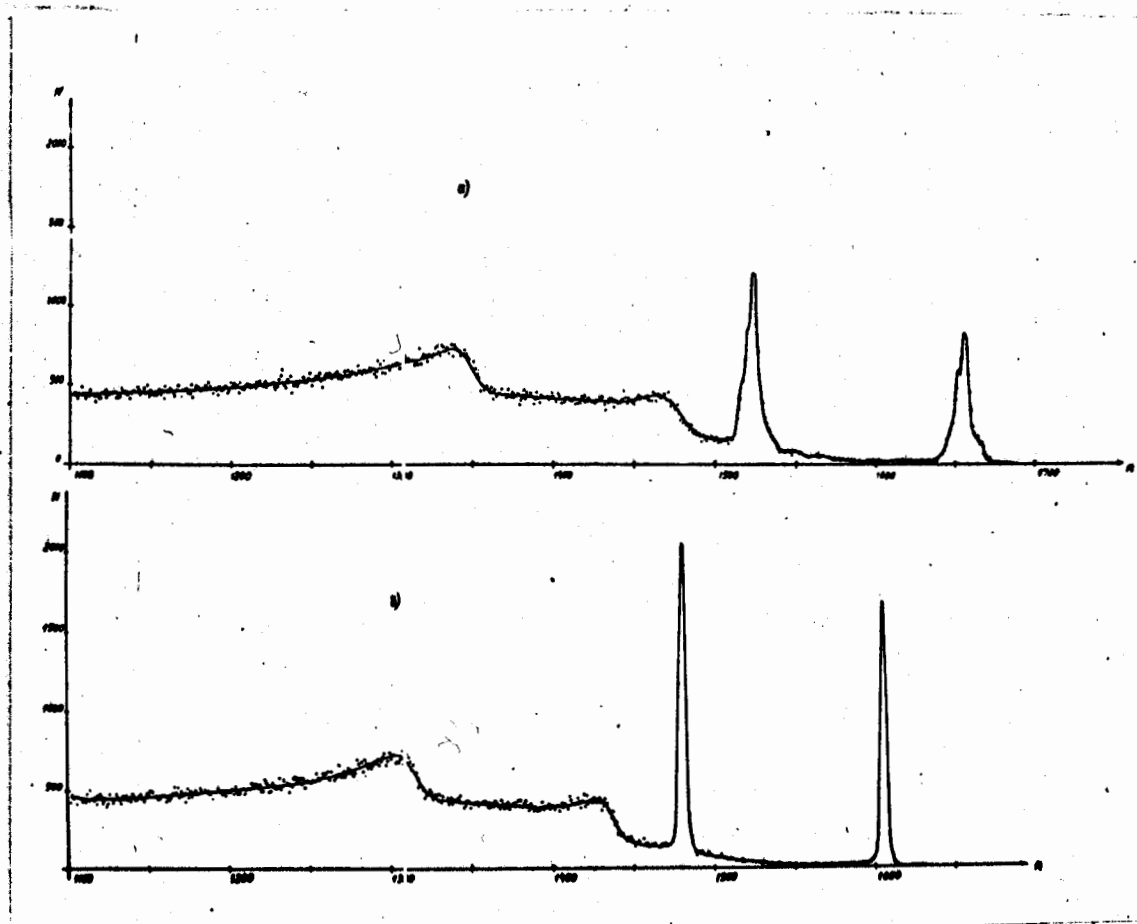


Рис.3 Искаженный (а) и скорректированный на уход "нуля" коэффициента усиления (б)  $\gamma$  - спектры  $^{60}\text{Co}$ .



Рассмотренные выше методы коррекции спектров эффективны как для динамических (дрейф), так и для статических (сдвиг) изменений корректируемых параметров (в отличие от динамических изменений, имеющих место в процессе регистрации, сдвиги предполагаются постоянными в течение одного цикла измерений).

В некоторых случаях достаточно скорректировать систему на статические изменения параметров. Типичной и наиболее распространенной задачей такого рода является калибровка спектрометра.

Данный метод удобно применять также для суммирования спектров и определения рабочих характеристик различных измерительных систем в случае обработки по одной и той же программе событий, полученных в различных экспериментальных ситуациях.

Для достаточно медленных изменений "нуля" и коэффициента усиления спектрометра процедура коррекции может быть существенно упрощена. В ряде работ /14,15/ описаны методы, обеспечивающие коррекцию характеристик спектрометра по периодически измеряемым эталонным спектрам. Сущность предложенного в работе /14/ метода заключается в вычислении факторов сдвига "нуля" и коэффициента усиления путем сравнения текущего калибровочного распределения, получаемого непосредственно перед измерением экспериментального спектра, с эталонным калибровочным распределением, хранящимся в памяти машины (таких распределений может быть несколько). Эти факторы сдвигов используются для составления исправленного экспериментального спектра.

Рассмотренный метод коррекции и его применение для энергетической калибровки спектрометров достаточно точен и дает хорошие результаты, но связан с необходимостью иметь эталонные источники определенного энергетического состава и активности.

Так же, как и для коррекции дрейфов, для амплитудной калибровки спектрометра и компенсации сдвигов удобнее использовать генераторы эталонных импульсов. В ряде работ для этих целей используются эталонные генераторы, управляемые ЭВМ. В работе /16/ ЭВМ РДР-8 управляет точным делителем (17 бит), который подключен к высокостабильному эталонному напряжению и к ртутному реле. Эталонные импульсы от аналого-цифрового преобразователя регистрируются в памяти ЭВМ. Таким образом получается зависимость  $N=f(A)$ . Такая процедура выполняется автоматически, если она повторяется достаточно часто, то можно получить "историю дрейфа" "нуля" и коэффициента усиления за время эксперимента, а затем внести соответствующую коррекцию. Кроме этих основных операций такая система позволяет точно измерить профиль канала, определить его границы и по результатам этих измерений оценить дифференциальную нелинейность.

Для энергетической калибровки используются более простые методы. Перед началом измерения снимается калибровочный спектр, имеющий достаточное число линий с известной энергией.

Если нелинейность спектрометра составляет десятые доли процента, то во многих случаях для калибровки достаточно кусочно-линейной аппроксимации зависимости  $E=f(N)$  /17/. Тогда энергия линии, находящейся между двумя калибровочными пиками с энергией  $E_1$  и  $E_2$  (номера каналов равны соответственно  $n_1$  и  $n_2$ ), определяется из выражения

$$E_i = \frac{(E_2 - E_1) n_i}{n_2 - n_1} + \frac{n_2 E_1 - n_1 E_2}{n_2 - n_1}. \quad (\text{П} - 5)$$

Калибровочная кривая может быть аппроксимирована с большей точностью, если по конечному числу известных точек проложить методом наименьших квадратов полином 3-й или 4-й степени. Однако в некоторых случаях (например, когда в калибровочном спектре нет известных линий в конце энергетической шкалы) экстраполяция может быть неточной. Иногда для калибровки используются пики одиночного и двойного вылетов, т.к. разность энергии между ними точно известна. В этом случае полином прокладывается по известным точкам калибровочного спектра и по участкам, для которых известно  $\frac{dE}{dN}$ . Точность калибровки при этом существенно возрастает.

### 3. Другие виды коррекции спектров.

#### 3.1. Коррекция амплитудных спектров, искаженных наложением импульсов.

Явление наложения описано теоретически /18/ и предложены некоторые схемные решения для выделения наложенных импульсов. Сложность проблемы заключается в том, что не существует общих методов её решения; так, например, при наложениях на фронте импульса обычно применяются схемы выделения, т.к. в этом случае форма импульса существенно изменяется, и установить акт наложения достаточно просто. Если наложение — зависимый от времени статистический процесс, то использование схем выделения часто является единственной возможностью предотвратить искажение спектра, поскольку для математических расчетов необходимо знать зависимость процесса от времени, которая либо очень сложна, либо неизвестна; наконец, при любом законе наложений форма искаженного спектра зависит от параметров детекторного импульса,

поэтому при одном и том же законе наложений задача может решаться различными путями.

На практике обычно используются комбинированные способы, в которых наложение на фронте импульса устраняется схемными методами, а наложения на "хвосте" вычисляются математическими методами и при обработке спектра вносится соответствующая коррекция. Рассмотрим один из таких методов /19/.

Пусть  $\rho$  - амплитуда плотности вероятности наложения на "хвост" импульса;  $q$  - амплитуда плотности вероятности "идеального" (измеряемого) спектра, тогда действительная плотность вероятности имеет амплитуду  $A$ , записанную анализатором, равна ж)

$$A(i) = \sum_{k=0}^{i-1} q(i-k) \cdot \rho(k+1), \quad (\text{П-6})$$

где  $\rho$  и  $q$  - плотности вероятности двух независимых случайных событий;  $i$  - номер канала.

Если  $A$  и  $\rho$  известны,  $q$  может быть вычислено из (6).

Распределение  $\rho$  может быть либо вычислено по форме спектра, средняя скорость и амплитудное распределение которого известны, либо измерено посредством определения уровня нулевой линии

в моменты времени, статистически не зависящие от времени появления детекторных импульсов (например, от генератора импульсов, имеющего фиксированную частоту).

Уравнение (6) может быть преобразовано для определения

$$q : \quad q(i) = \frac{1}{\rho(1)} \left[ A_i - \sum_{k=1}^{i-1} q(i-k) \cdot \rho(k+1) \right] \quad (\text{П-7})$$

На рис.4 показаны искаженный и скорректированный спектры <sup>137</sup>Cs /19/.

ж) Уравнение (6) записано для униполярных детекторных импульсов.

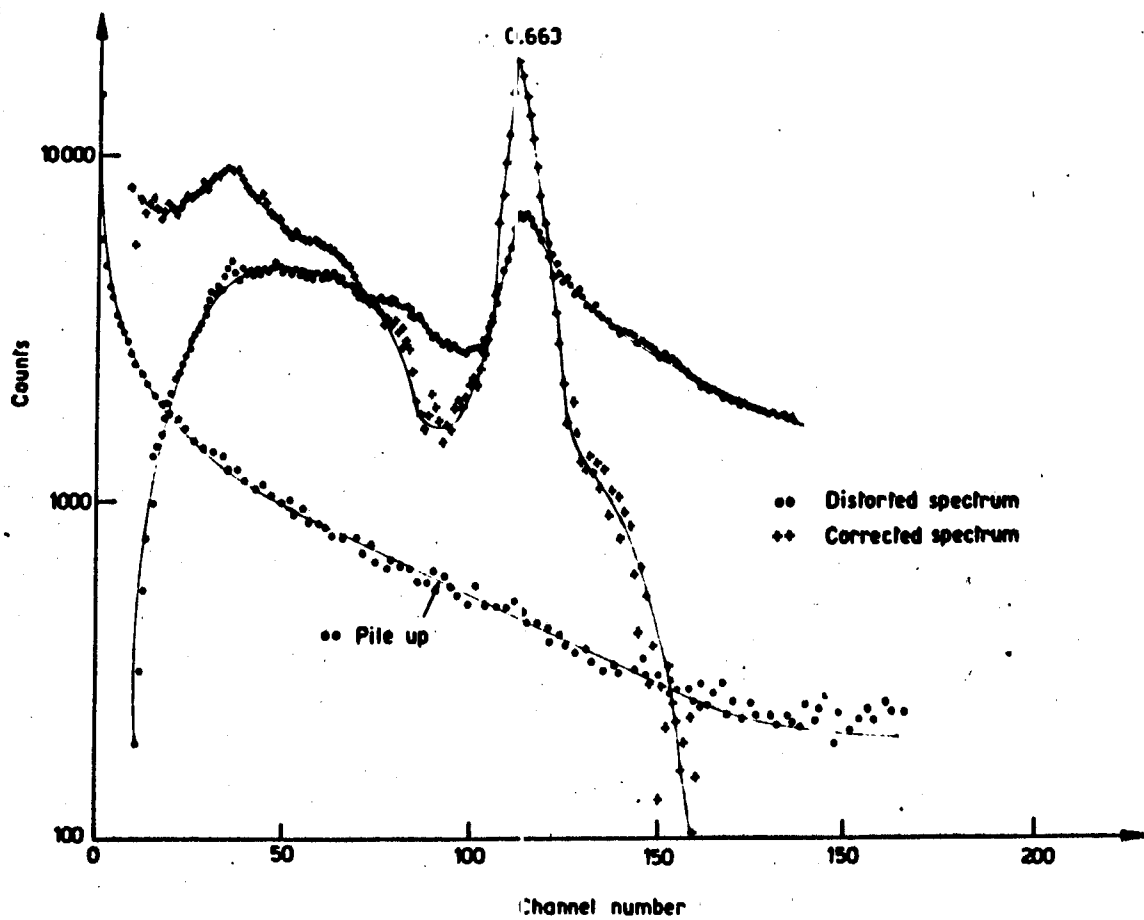


Рис.4 Искаженный и скорректированный спектры  $^{137}\text{Cs}$ .

### 3.2. Поправки на мертвое время.

В большинстве случаев коррекция амплитудных спектров на мертвое время сводится к определению нормирующего коэффициента, на который умножается искаженный спектр, поскольку для анализаторов с закрытым на время регистрации входом форма измеренного спектра и спектра потерь совпадают. Для наиболее типичных случаев нормирующий коэффициент может быть определен из следующих выражений:

а) Средняя скорость поступления импульсов на вход анализатора ( $N_0$ ) и мертвое время ( $t_m$ ) постоянны. В этом случае скорость регистрации равна

$$n = \frac{N_0}{1 + N_0 t_m} \quad (\text{П-8})$$

б)  $N_0 = \text{const}$ , мертвое время переменное и равно времени преобразования амплитуды импульса плюс время работы памяти.

В выражении (8)  $t_m$  заменяется на  $t_{\text{эфф}}$ , равное

$$t_{\text{эфф}} = t_n + \bar{t}_m,$$

где  $\bar{t}_m$  - приблизительно равно половине максимального времени преобразования для равномерного спектра и  $t_0 + k t_k$  - для спектра произвольной формы ( $t_0$  - время запоминания импульса в нулевом канале;  $k$  - положение центра тяжести амплитудного распределения;  $t_k$  - время преобразования на один канал).

в)  $N_0 = \text{const}$ ,  $t_m = t_{\text{эфф}}$ . В более точных расчетах нормирующего коэффициента необходимо учитывать наличие фиктивных циклов работы анализатора, в течение которых происходит проверка соответствия амплитуды импульса определенным условиям

(дискриминация нижнего и верхнего уровней, совпадения и т.д.). Если импульс по каким-либо причинам бракуется, то, хотя запись в память не производится, эффективное мертвое время возрастает /20/.

Вероятность того, что в течение фиктивного цикла на вход анализатора придет по крайней мере один импульс, равна

$$C = 1 - \exp(-t_{\phi} N_0), \quad (\text{П-9})$$

где  $t_{\phi}$  - фиктивное время ( $t_{\phi}$  равно времени задержки импульса на входе линейных "ворот"). Среднее число импульсов, потерянных в течение анализа, равно  $t_{\text{эпф}} N_0$ , а потери импульсов в течение фиктивных циклов составляют величину  $C t_{\phi} N_0$ . Учитывая, что за одним фиктивным циклом может следовать второй и т.д., общие потери импульсов за время регистрации (T) определяются следующим выражением

$$(N_0 - n)T = nT \{ t_{\text{эпф}} N_0 + C + C [ t_{\text{эпф}} N_0 + C + C(\dots) ] \}. \quad (\text{П-10})$$

Произведя свертку в правой части (10), получим:

$$N_0 = n(1 + t_{\text{эпф}} N_0) \frac{1}{1 - C} = n(1 + t_{\text{эпф}} N_0) \exp(t_{\phi} N_0). \quad (\text{П-11})$$

По известным  $n$ ,  $t_{\text{эпф}}$  и  $t_{\phi}$  легко вычислить  $N_0$ , можно решить и любую обратную задачу.

Существуют и более сложные методы введения поправок на мертвое время, учитывающие форму спектра, скорость счета в каждом канале /21/, наличие промежуточной памяти /22/ и т.д., однако рассмотрение этих методов выходит за рамки данной лекции.



В некоторых современных анализаторах введены специальные устройства, позволяющие не только вычислять поправки, но и автоматически корректировать спектр в процессе его накопления. Подробно эти вопросы рассмотрены в работе /23/.

#### 4. Программы предварительной обработки скорректированных спектров.

Рассмотренные выше методы коррекции имеют более или менее самостоятельный характер; при определенной постановке эксперимента и соответствующем электронном оснащении можно добиться тех же результатов применением различных схемных решений. Поэтому можно считать, что именно с момента получения скорректированных спектров начинается собственно обработка с использованием ЭВМ.

##### 4.1. Организация и управление процессом обработки.

Основным препятствием на пути полной автоматизации процесса обработки была и есть необходимость (часто неизбежная) участия экспериментатора в процессе обработки. Вытекающая отсюда необходимость интерпретации исходного числового материала и результатов поэтапной обработки, а также ввод решений экспериментатора в машину приводили к длительным задержкам в процессе обработки и часто делали бессмысленной автоматизацию отдельных её этапов.

В настоящее время уровень развития вычислительной техники, а также наличие развитых внешних устройств ЭВМ, позволяют соединить в непрерывную цепь отдельные этапы обработки, включая и этапы обработки информации самим экспериментатором.

Одной из таких возможностей является использование визуального канала связи человека и ЭВМ - осциллографа со световым карандашом /24/. Это устройство и наличие символического языка, позволяющего обращаться к ЭВМ при решении определенных заранее запрограммированных задач и получать от неё ответы в понятной форме, устраняют трудности при автоматизации обработки спектральной информации, вызванные участием в ней экспериментатора. При этом удается автоматизировать как графическую интерпретацию исходных и промежуточных данных, так и выполнение всех необходимых расчетов. Управление ЭВМ в процессе обработки осуществляется непосредственно с пульта осциллографа при помощи специального языка символов, в котором каждой подпрограмме или группе подпрограмм поставлен в соответствие определенный символ.

Непрерывность процесса обеспечивается программным аппаратом поддержания контакта оператора с ЭВМ через визуальный канал связи. На всех этапах обработки на экране осциллографа представляется изображение информации (график), результаты действий оператора и работы ЭВМ, а также необходимые для работы символы вместе со вспомогательной информацией. Окончательные и промежуточные результаты могут быть выведены на любое внешнее устройство ЭВМ.

#### 4.2. Структура программы организации обработки.

##### Вспомогательные подпрограммы.

Организующая программа в первую очередь должна обеспечить: изображение обрабатываемого спектра в любой заданной форме (график, растр, изометрия); регенерацию изображения; доступ ко всем подпрограммам, имеющимся в программе обработки;

ответную реакцию ЭВМ на каждое обращение оператора к программе обработки.

Набор вспомогательных подпрограмм не является жестко заданным, он может варьироваться в широких пределах, однако можно выделить основные типы подпрограмм, которые используются практически при обработке всех видов спектрометрической информации /24/:

- а) ввод данных из внешних устройств;
- б) выведение на осциллограф участка изображения произвольной длины;
- в) масштабирование;
- г) отметка характерных точек спектра;
- д) преобразование информации;
- е) вариация яркости изображения;
- ж) сдвиг участка изображения влево (вправо) на заданную длину;
- з) вывод данных на внешние устройства.

Этот набор подпрограмм позволяет экспериментатору детально рассмотреть спектр и произвести его качественную оценку.

#### 4.3. Некоторые операции предварительной обработки.

Операции предварительной обработки имеют своей целью подготовить информацию для дальнейшей обработки по определенным программам и дать некоторое количественное представление о характере обрабатываемого спектра. К числу наиболее типичных подпрограмм этого класса относятся /24,25/:

- 1) исправление выпавших точек;
- 2) сглаживание спектра по определенному закону. В этом пункте необходимо сделать некоторые замечания: а) если сглаживание производится для качественных оценок спектра, то на закон сглаживания практически не накладывается никаких ограничений (это может быть метод нахождения центра тяжести треугольника, закон  $\frac{1}{y} N_{i-1} + \frac{1}{2} N_i + \frac{1}{y} N_{i+1}$ , парабола и т.д.); б) если сглаживание производится для уменьшения шумовых и статистических флуктуаций, то выбор закона сглаживания в большинстве случаев predetermined самой методикой эксперимента<sup>/26/</sup>;
- 3) определение координат любой помеченной точки (номер канала, число отсчетов, энергия);
- 4) определение энергетического разрешения и калибровка;
- 5) отыскание максимума (минимума) на определенном участке спектра;
- 6) различные виды коррекции, описанные в предыдущих разделах;
- 7) отбор полезной информации;
- 8) формирование дополнительной информации для дальнейшей обработки (например, определение начальных условий для обработки по методу наименьших квадратов);
- 9) вычитание фона в тех случаях, когда его характер может быть установлен экспериментально. В общем случае, многие компоненты фона связаны непосредственно с самим процессом регистрации излучения и поэтому их нельзя учесть в отдельном опыте. Сюда относятся рассеяние изучаемого излучения на частях экспериментальной установки, тормозное излучение, дополнительное (вторичное) излучение поглотителей и т.д. При

изучении дискретных спектров  $\gamma$  - квантов с хорошим разрешением под фоном можно понимать и комптоновские распределения под фотопиками. Во всех этих случаях фон обычно учитывается методами аппроксимации какой-либо подходящей функцией при разложении спектра на отдельные компоненты;

10 переход к другой системе координат.

В этот список могут быть также включены при необходимости операции поканальной сортировки событий, подпрограммы преобразования информации, различного рода нормировки и т.д.

Следующим этапом является окончательная обработка спектрометрической информации.

### III. ОКОНЧАТЕЛЬНАЯ ОБРАБОТКА СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ.

Основным математическим методом при окончательной обработке спектрометрической информации является хорошо известный метод наименьших квадратов (МНК) /27/. Прежде всего напомним основные этапы постановки и решения этой задачи в достаточно общем и в то же время сравнительно простом случае спектра с одной независимой и точно известной переменной  $x$ .

Итак, пусть экспериментальный спектр представляет собой последовательность чисел  $\Phi(x_i)$ . Будем считать, что каждое значение  $\Phi$  подчиняется гауссовскому распределению с известной дисперсией и ошибкой  $\sigma_i$ .

Для спектроскопических задач оба эти требования обычно выполнены достаточно хорошо. Допустим далее, что для каждой экспериментальной точки существует гипотетическое точное

значение  $F_i$ , зависящее не только от  $x_i$ , но и от набора каких-то параметров  $F(x_i, a_1, \dots, a_m)$ . Выбор экспериментатором функции  $F$  допускает известный произвол и к обсуждению этого вопроса мы вернемся позже.

Принцип максимума правдоподобия требует выбрать такие значения параметров  $a_k$  ( $k = 1 \div m$ ), при которых вероятность получить при измерении фактически наблюдавшиеся величины была бы максимальной. Из этого требования для нормально распределенных экспериментальных точек вытекает хорошо известное исходное для МНК требование:

$$\chi^2 = \sum_i [\phi(x_i) - F(x_i, a_1, \dots, a_m)]^2 \frac{1}{\sigma_i^2} = \min. \quad (\text{III-1})$$

Нахождение значений параметров  $\{a_k\}$ , для которых (I) минимально и есть математическое содержание МНК. Существует несколько методов минимизации функционала (I), однако для краткости мы ограничимся упрощенным рассмотрением наиболее хорошо известного метода линеаризации /28/. Требование (I) эквивалентно системе  $m$  уравнений ( $m$  - число параметров):

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} = 0, \quad k = 1 \div m. \quad (\text{III-2})$$

Сложность решения задачи определяется видом зависимости и числом параметров  $m$ . В случае линейной зависимости (линейно от параметров, но не от  $x_i$ )

$$F = \sum a_k \varphi_k(x_i) \quad (\text{III-3})$$

задача имеет точное решение, так как система (2) становится системой линейных уравнений, способы решения которой общеизвестны.

Если зависимость вида (3) не имеет места, на сцену выступает метод линеаризации.

В окрестности некоторой точки ( в  $m$  - мерном пространстве параметров)  $\vec{A}_0 \{a_1^0, \dots, a_m^0\}$  при условиях, обычно выполняющихся для  $F$ , имеет место разложение:

$$F(x, \vec{A}) = F(x, \vec{A}_0) + (\vec{A} - \vec{A}_0) \text{grad} F(x, \vec{A}_0) + \dots \quad (\text{III-4})$$

Если ограничиться первыми двумя членами разложения, и такое приближенное представление  $F$  использовать в системе уравнений (2), то она снова становится линейной, но уже относительно некоторого "шага"  $\vec{A} - \vec{A}_0$  в пространстве параметров.

Можно показать, что этот шаг (прибавки к параметрам, найденные решением системы (2) с использованием разложения (4)) всегда направлен в сторону минимума  $\ell^2$ . Однако длина шага может быть как больше, так и меньше расстояния от точки  $A_0$  до минимума. Поэтому возникает необходимость в организации итерационного процесса, в котором отправная точка для каждого последующего шага является результатом предыдущего. Эта процедура при всей её наглядности содержит в себе целый ряд "коварных" ловушек для наивного экспериментатора и о них мы будем говорить более подробно.

Элементы определителя рассматриваемой системы уравнений имеют вид:

$$v_{j,k} = \sum_i \frac{\partial F_i}{\partial a_j} \cdot \frac{\partial F_i}{\partial a_k} \cdot \omega_i; \quad \omega_i = \frac{1}{\sigma_i^2} \quad (\text{III-5})$$

Отсюда сразу видно, что если гипотеза  $F$  такова, что

$$\frac{\partial F_i}{\partial a_j} = c \frac{\partial F_i}{\partial a_k} \quad (\text{III-6})$$



Такая ситуация может возникнуть и в процессе счета.

Гипотеза (8) может рассматриваться скорее как гипотеза - шутка. Однако и в ряде вполне серьезных задач возникает аналогичная ситуация. Для конкретности рассмотрим упрощенную гипотезу

$$F(E) = A \left\{ 1 - \exp \left[ - \frac{\nu}{\left( \frac{E-E_0}{\Gamma/2} \right)^2 + 1} \right] \right\}, \quad (\text{III-II})$$

которая возникает в резонансной мессбауэровской и нейтронной спектроскопии для описания зависимости поглощения от энергии. В общем случае параметр  $\nu$  (эффективная толщина фильтра) конечно, не является "лишним". Однако, в случаях, когда  $\nu \ll 1$ , выражение (II) переходит в простой лорентциан

$$F(E) = A \frac{\nu}{\left( \frac{E-E_0}{\Gamma/2} \right)^2 + 1} \quad (\text{III-12})$$

и из одного экспериментального спектра определить параметры  $A$  и  $\nu$  невозможно. О таких параметрах принято говорить, что они сильно коррелируют. Детальное математическое описание этого явления приводится в /27/. Качественно же корреляция имеет место, если одно и то же свойство кривой (высота пика в (12)) может быть с равным успехом описано изменением более чем одного параметра.

В спектроскопии линейчатых спектров обычно мы имеем дело с пиками или провалами, каждый из которых, в первом приближении, можно характеризовать с помощью трех параметров: положения, ширины и амплитуды. Эти три параметра, согласно качественному определению, между собой не коррелируют. К такому выводу можно прийти и количественно, анализируя матрицу  $\| \nu_{j,k} \|$  для какой-либо функции, описывающей пик.

Если в анализируемом спектре присутствуют две или более линий, то появляется возможность корреляций между параметрами разных пиков. Если пики не перекрываются, то недиагональные элементы в матрице равны нулю и корреляций нет. Если перекрытие сильное, то и корреляции становятся сильными, и анализ с помощью МНК может стать невозможным. Другими словами, в анализируемом спектре не содержится достаточно информации для отыскания всех параметров.

Существуют два пути для борьбы с этой трудностью. Первый — уменьшение числа независимых параметров, второй — внесение добавочной информации, не содержащейся непосредственно в анализируемом спектре. Оба пути можно осуществить множеством способов, определяющимися физическим смыслом этих ограничений.

Рассмотрим несколько приемов, хорошо зарекомендовавших себя в практике обработки.

а). Фиксация параметра. В используемой в ОИЯИ подпрограмме МНК предусмотрена возможность фиксации любого параметра. Фиксированный параметр по сути дела становится точно заданной константой, не варьируется в процессе счета и, естественно, не участвует в корреляции. Недостатком этого приема является необходимость иметь достаточно точное значение этого параметра из других источников.

б). Наложение дополнительных уравнений связи на свободные параметры. Поясним смысл этой процедуры. Допустим, что в анализируемом спектре имеются три пика, первые два из которых сильно перекрываются, а третий — изолирован. Допустим также, что " *a priori* " известна связь между ширинами пиков вида:

$$\Gamma_1 = f(\Gamma_3), \quad \Gamma_2 = \varphi(\Gamma_3); \quad (\text{Ш-13})$$

случай реальный для ядерной гамма и мессбауэровской спектроскопии).

Включение условия (13) в процесс счета осуществляется довольно просто, без изменения исходной гипотезы (хотя и эквивалентно такому изменению) и позволяет значительно уменьшить корреляции между параметрами двух перекрывающихся пиков. Разумеется, вид функций  $f$  и  $\varphi$  заранее должен быть известен. Другим примером может служить заранее известное соотношение между площадями пиков.

$$A\Gamma_1 = \alpha A_2\Gamma_2 = \beta A_3\Gamma_3, \quad (\text{Ш-14})$$

где  $A$  и  $\Gamma$  - амплитуда и ширина пика соответственно. (Случай, часто встречающийся в мессбауэровской спектроскопии).

В общем случае уравнение связи имеет вид:

$$f(a_1, \dots, a_m) = 0. \quad (\text{Ш-15})$$

Если оно разрешимо относительно "плохого" параметра,

$$a_i = \varphi(a_k, \dots, a_e), \quad (\text{Ш-16})$$

то стандартная техника наложения ограничений следующая:

1) параметр  $a_i$  фиксируется и ему всегда присваивается текущее значение  $a_i = \varphi(a_k, \dots, a_e)$ ;

2) производные  $F$  по остальным параметрам получают добавки

вида:

$$\frac{\partial F}{\partial a_i} \frac{\partial \varphi}{\partial a_k} \quad (\text{Ш-17})$$

Эта процедура полностью эквивалентна соответствующему изменению исходной гипотезы  $F$ .

Другой путь является менее жестким. К экспериментальному спектру добавляется еще одна "точка", в которой в качестве гипотезы берется левая часть (15), а "экспериментальное значение" берется равным нулю, с некоторой "ошибкой"  $\sigma$  и соответствующим весом. Этот прием гарантирует выполнение уравнения связи (15) с точностью  $\sim \sigma$  при условии, что уравнение (15) является "хорошим" уравнением. Уменьшением  $\sigma$ , естественно, можно обеспечить сколь угодно точное выполнение (15). Однако, и здесь не стоит увлекаться. Действительно, точное выполнение (15) немедленно приводит к равенству нулю определителя (5), а именно этого мы стремились избежать. По-видимому, разумной для такой точки с условием следует считать ошибку, соответствующую фактической дисперсии  $\Psi(a_k, \dots, a_n)$ ;  $\chi^2$  при этом должно увеличиться на 1.

Несколько слов о внесении добавочной экспериментальной информации, не содержащейся в анализируемом спектре.

Допустим, что параметр  $a_k$  известен (независимо от рассматриваемого спектра) с некоторой ошибкой

$$a_k = \alpha \pm \sigma. \quad (\text{III-18})$$

Добавим к экспериментальному спектру точку, в которой

$$F = \alpha, \quad F = a_k, \quad \omega = \frac{1}{\sigma^2}. \quad (\text{III-19})$$

При этом даже совсем "безнадежный" параметр перестает коррелировать, и если в анализируемом спектре не содержится никакой информации о нем, то после минимизации он сохраняет прежнее значение и, естественно, прежнюю ошибку:

Этот метод, по-видимому, является самым корректным из всех рассмотренных, но в то же время его применимость является наиболее ограниченной. Обычно о неизвестном параметре действительно ничего не известно. Имеется целый ряд других не менее интересных проблем, возникающих при окончательной обработке.

Однако нам кажется более целесообразным продемонстрировать преимущества окончательной обработки с использованием МНК, по сравнению с традиционными "ручными" методами. Первым и основным достоинством является то, что при корректной постановке задачи из экспериментального спектра извлекается максимум информации. Под этим подразумевается, что оценки ошибок параметров в МНК оказываются наименьшими. Разумеется, распределение оценок параметров, соответствующих минимуму  $\chi^2$ , оказывается гауссовским (по крайней мере в линейных задачах и в задачах, хорошо линеаризующихся в пределах "объема ошибок" параметров). Малость ошибок, полученных с помощью МНК, иногда вызывает даже скептицизм, который, однако, скорее следует адресовать к постановке опыта или выбору параметризации, чем к методу обработки.

Так, например, определение положения пика с точностью до 0,05 канала, едва ли возможное с помощью ручных методов, является обычным при обработке МНК. И если постановка опыта такова, что нет источников ошибок, не включенных в принятую для обработки гипотезу, разброс параметров, определенных из многих независимо измеренных спектров, действительно подчиняется распределению со столь малой ошибкой.

Для иллюстрации сказанного приведем экспериментальную зависимость положения мессбауэровского пика от температуры /29/ (рис.5), причем положение пика и ошибка определялись с помощью

Этот метод, по-видимому, является самым корректным из всех рассмотренных, но в то же время его применимость является наиболее ограниченной. Обычно с неизвестным параметром действительно ничего не известно. Имеется целый ряд других не менее интересных проблем, возникающих при окончательной обработке.

Однако нам кажется более целесообразным продемонстрировать преимущества окончательной обработки с использованием МНК, по сравнению с традиционными "ручными" методами. Первым и основным достоинством является то, что при корректной постановке задачи из экспериментального спектра извлекается максимум информации. Под этим подразумевается, что оценки ошибок параметров в МНК оказываются наименьшими. Разумеется, распределение оценок параметров, соответствующих минимуму  $\chi^2$ , оказывается гауссовским (по крайней мере в линейных задачах и в задачах, хорошо линеаризующихся в пределах "объема ошибок" параметров). Малость ошибок, полученных с помощью МНК, иногда вызывает даже скептицизм, который, однако, скорее следует адресовать к постановке опыта или выбору параметризации, чем к методу обработки.

Так, например, определение положения пика с точностью до 0,05 канала, едва ли возможное с помощью ручных методов, является обычным при обработке МНК. И если постановка опыта такова, что нет источников ошибок, не включенных в принятую для обработки гипотезу, разброс параметров, определенных из многих независимо измеренных спектров, действительно подчиняется распределению со столь малой ошибкой.

Для иллюстрации сказанного приведем экспериментальную зависимость положения мессбауэровского пика от температуры /29/ (рис.5), причем положение пика и ошибка определялись с помощью

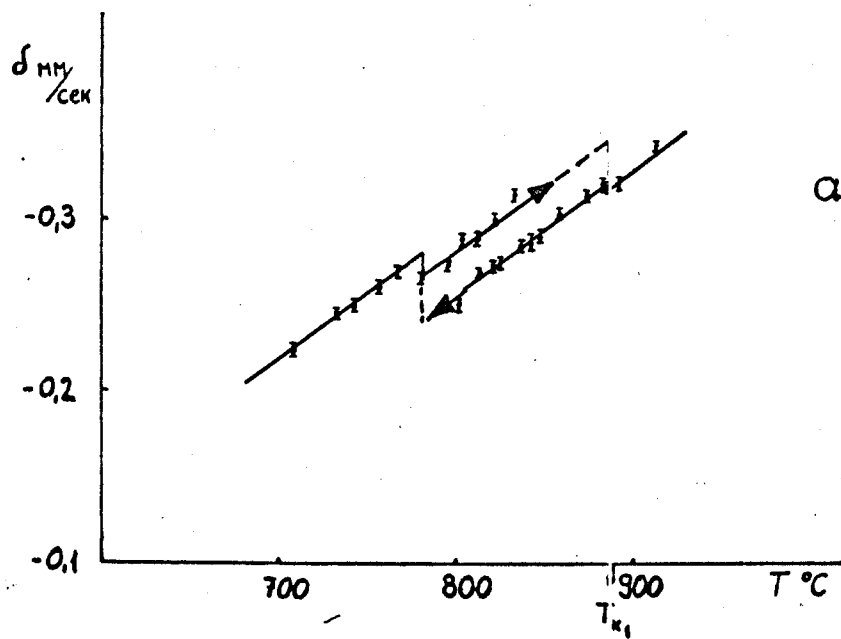
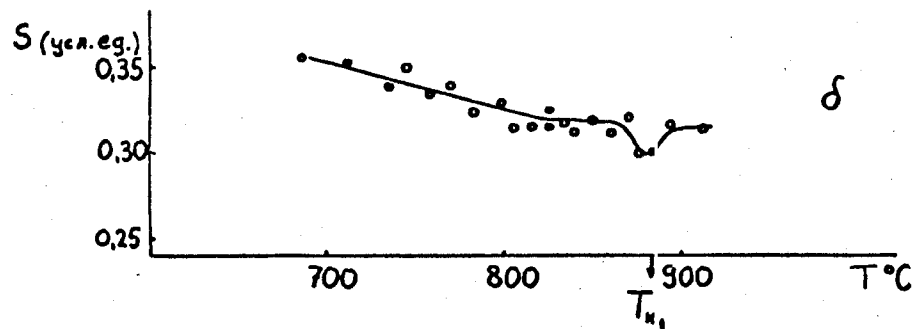


Рис. 5 Зависимость положения пика от температуры /29/ (кривая а). Ширина пика - 0,35 мм/сек.

МНК. Из этого же рисунка также видно, что после обработки на ЭВМ становятся явными эффекты, которые иначе обнаружить вряд ли возможно.

Для обычных спектроскопических ситуаций ручная обработка превышает ошибку в 3-5 раз. Кроме того, ручная обработка сложных спектров носит весьма субъективный характер. МНК и в этом отношении имеет вполне очевидные преимущества. И, наконец, время, затрачиваемое на обработку спектров, при разумной организации общения экспериментатора с машиной, сокращается на 2-3 порядка. Последняя оговорка нам кажется весьма существенной, так как на сегодня основные трудности поджидают экспериментатора именно в области организационной. Подробно эти вопросы рассмотрены в лекции И.Томика и В.Р.Трубникова.

В заключение несколько слов о применении МНК при окончательной обработке в конкретных экспериментах.

В мессбауэровской спектроскопии измеряется интенсивность счета детектора в зависимости от скорости движения исследуемого объекта. Обычное лоренцовское приближение

$$F(i) = A_0 - \sum_k \frac{A_{ik}}{\left(\frac{v_k - v_i}{\Gamma_k/2}\right)^2 + 1} \quad (\text{III-20})$$

здесь оказывается весьма подходящим инструментом для анализа сравнительно простых спектров. С применением определенных уравнений связи для спектров, содержащих 6 пиков магнитного расщепления (случай  $Fe^{57}$ ), число свободных параметров удается сократить с 19 (по формуле 20) до 6. Такая аппроксимация оказывается целесообразной в случае весьма сложных спектров (до 18 пиков, из которых разрешаются только 10-12), когда прямая



аппроксимация лоренцианами становится невозможной (рис. 6) /29/.

Обработка результатов нейтронной спектрометрии является весьма обширным предметом, что связано с разнообразием самих исследований. Относительно простая ситуация (хотя простой её назвать трудно) возникает в спектрометрии полных сечений резонансных нейтронов. Наиболее корректный метод обработки, носящий название "метод формы" /30/, использует довольно строгое параметрическое описание формы линий спектра и метод наименьших квадратов для нахождения этих параметров. Осложнения здесь возникают в двух случаях: при "плохой" форме функции разрешения, которая в отдельных ситуациях может оказаться даже нестабильной во времени и т.д., - и при большой плотности линий в спектре, когда количество искоемых параметров становится чрезмерно большим, а интерференция между отдельными линиями не позволяет обрабатывать спектр по частям. В этих ситуациях применяется "метод площадей", развитый еще задолго до появления ЭВМ /31/. Этот метод включает в себя какой-либо способ приближенного интегрирования в пределах, задаваемых вручную, что, к сожалению, может приводить к дополнительным ошибкам. Отличительной особенностью обработки при спектрометрии полных сечений является необходимость совместной обработки нескольких спектров, что приводит к сравнительно большим затратам машинного времени.

Еще об одной специфичной для нейтронной спектрометрии задаче - о вычислении поправок на многократное рассеяние. Задача о многократном рассеянии ("блуждании") нейтрона в среде определенной формы и с заданной зависимостью вероятности рассеяния от энергии нейтрона исторически возникла вместе с появлением

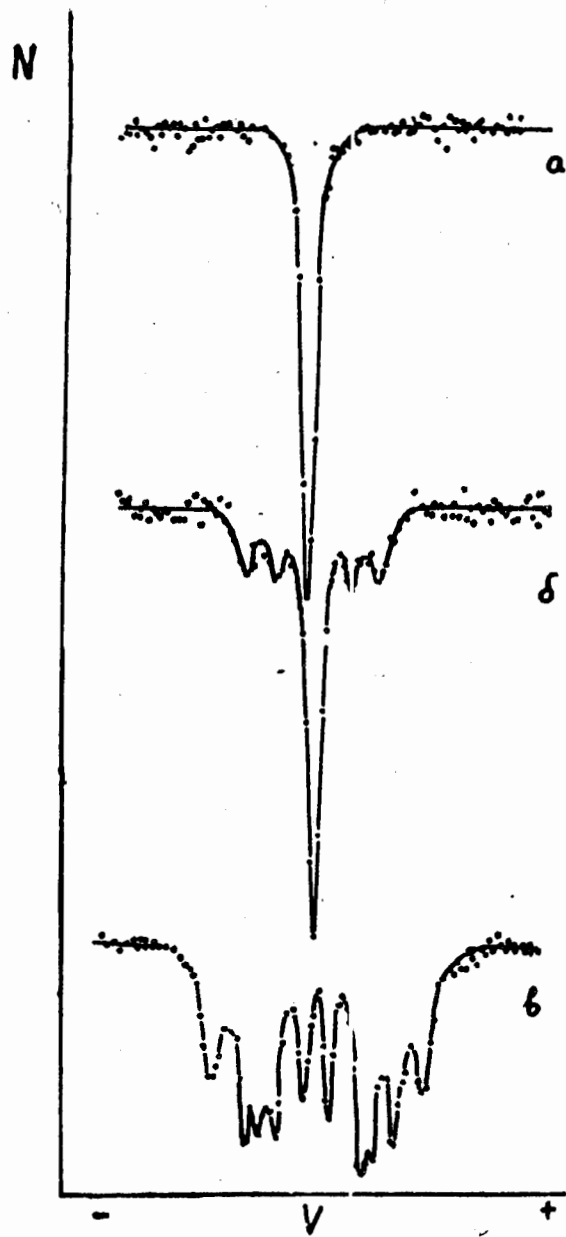


Рис.6 Мёссбауэровские спектры  $Fe^{57}Al^{129}I$ .

ЭВМ и не потеряла своей актуальности по сей день. Хотя обычно экспериментаторы стараются избегать многократных процессов при постановке опыта, это не всегда возможно сделать.

Расчеты по методу Монте-Карло здесь оказываются весьма полезным инструментом для вычисления соответствующих поправок /32/.

Другие исследования с помощью нейтронов (дифракция, неупругое рассеяние, исследования дважды дифференциальных сечений и т.д.) в отношении обработки являются весьма разнообразными, особенно в последней фазе, и вряд ли имеет смысл все их здесь перечислять.

Несколько иной подход, известный под названием "*stripping*" используется в течение многих лет для обработки амплитудных гамма-спектров /33/. В этом методе происходит разложение сложных спектров на "эталонные" компоненты. Искомой величиной является вес компонентов, который отыскивается методом наименьших квадратов. Эталонные спектры обычно измеряются на том же спектрометре. Более простой вариант этой техники недавно был разработан для обработки мессбауэровских спектров /34/. Интересной особенностью этой программы является хранение характеристик "эталонных" спектров (или самих спектров), что позволяет использовать данные других авторов и создавать обширные библиотеки "эталонных" спектров. На рис.7 приведен пример разложения участка спектра <sup>199</sup>Pt /33/.

К сожалению, в столь короткой лекции мы не имеем возможности остановиться на целом ряде других не менее интересных проблем, связанных с окончательной обработкой спектрометрических данных с использованием ЭВМ, частью решенных, частично

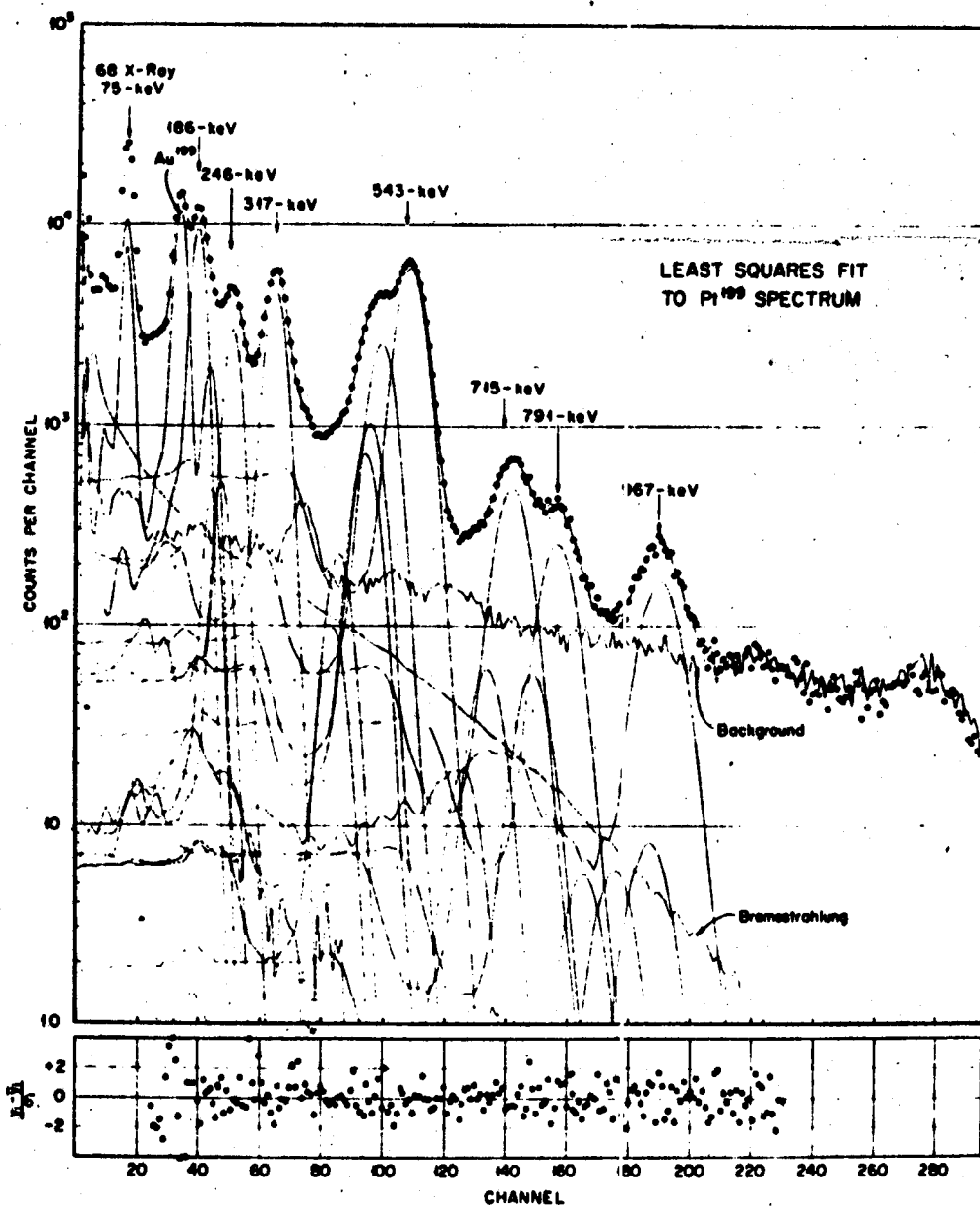


Рис.7 Анализ  $\gamma$ -спектра  $Pt^{199}$ , содержащего 19 компонент /33/

еще нет. К числу таких проблем следует отнести автоматизацию подготовки начальных условий, совместную обработку большого количества спектров, возможности прямого решения обратной задачи спектрометрии и др. Часть из них в какой-то степени затрагивается в других лекциях этой школы, многие проблемы в настоящее время еще находятся в стадии разработки.

## Литература

1. Г.И.Забиякин. Докторская диссертация, ОИЯИ, Дубна, 1967.
2. В.А.Владимиров, Ф.Дуда, Э.В.Лысенко. Препринт ОИЯИ, IO-3620, Дубна, 1968.
3. Ф.Дуда, О.И.Елизаров и др. Препринт ОИЯИ, IO-3780, Дубна, 1968.
4. B. Souček and D. Spínrad  
IEEE Trans. on Nucl. Sci., NS-13, N1 (1967) p. 783.
5. А.Н.Утюжников. Диссертация, Дубна, 1965.
6. G.N. Hooton at al.  
Harwell Report AERE - P4925 (May 1965)
7. Г.П.Жуков, Г.И.Забиякин и др. ПТЭ, № 6, 1968.
8. E. Nozbeck  
Proc. EANDC Conf., Karlsruhe (1964), p. 129.
9. Э.Г.Имаев, В.И.Приходько и др. Препринт ОИЯИ, P-IO-3754, Дубна, 1968.
10. A. Whitehead at al.  
IEEE Trans. on Nucl. Sci., NS-14, N1 (1967), p. 559.
11. J. Ladd and J. Kennedy  
In "Instr. Techn. in Nucl. Pulse Analysis",  
Washington, 1964, p. 150.
12. Г.И.Забиякин, В.И.Приходько и др. Препринт ОИЯИ P-2851, Дубна, 1966.
13. C. D. Goodman  
Proc. EANDC Conf., Karlsruhe (1964), p. 59.
14. D. Covell  
Nucl. Instr. Meth. v:36 (1965), p. 229
15. Г.И.Забиякин, В.И.Приходько и др. IV Симпозиум по радио-электронике, Прага, октябрь 1966. стр.367.

16. W. Black  
Nucl. Instr. Meth. v.53 (1967), p. 249.
17. И.Звольски, В.И.Приходько. Препринт ОИЯИ, 6-3517, Дубна, 1967.
18. G. Gold  
Rev. Sci. Instr. v.36 (1965), p. 787.
19. I. De Lotto at al.  
Nucl. Instr. Meth. v.40 (1966), n1, p169.
20. P. Paatero and K. Eskola  
Nucl. Instr. Meth. v.44 (1966), p 351.
21. I. N. Hooton and G. C. Best  
Nucl. Instr. Meth. v.56 (1967). p. 284.
22. Г.И.Забиякин, Т.Шетет, В.Д.Шибяев. ПТЭ, № 5 (1966), стр.115.
23. M. Deighton  
Nucl. Instr. Meth. v.14 (1961), p. 48.
24. З.В.Лысенко, И.Томик, В.Р.Трубников, Препринт ОИЯИ, 10-3331, Дубна, 1967.
25. Г.И.Забиякин, И.Звольски и др. Изв.АН СССР, серия физическая т.XXXI, № 10, стр.1601.
26. I. De Lotto and S. Osnaeni  
Nucl. Instr. Meth. v.54 (1967), p. 305.
27. Н.П.Клепиков, С.Н.Соколов. "Анализ и планирование экспериментов методом максимума правдоподобия", "Наука", М., 1964.
28. С.Н.Соколов, И.Н.Силин. "Нахождение минимумов функционалов методом линеаризации". Препринт ОИЯИ, Р-810, Дубна, 1961.
29. L. Cser , J. Ostanevich , L. Pal  
Phys. Stat. Sol. v.20 (1967), p. 581.

30. Э.Н.Каржавина, А.Б.Попов, Ю.С.Язвницкий, В.Н.Ефимов,  
Н.Ю.Ширикова. Препринт ОИЯИ, Р-2593, Дубна (1966).
31. В.Н.Ефимов, И.И.Шелонцев. Препринт ОИЯИ Р-641, Дубна (1961).
32. Ф.Ф.Михайлус, Л.Б.Пикельнер, Э.И.Шарапов. Препринт ОИЯИ  
Р-2455, Дубна (1965).
33. R.L. Heath, R.G. Helmer et al.  
Nuc. Instr. Meth. v. 47, 281, 305 (1967).
34. A.H. Muir  
Analysis of Complex Mössbauer Spectra  
by Stripping Techniques.  
Preprint SC-PP-68-79.

Рукопись поступила в издательский отдел  
25 декабря 1968 года.