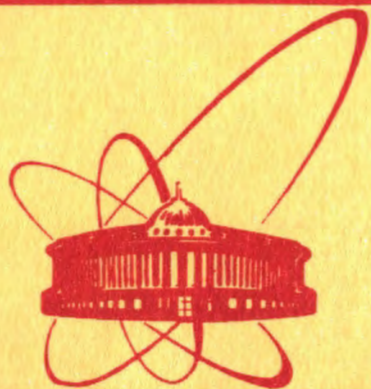


2/VI-80



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

2464/2-80

P10-80-105

Н.Г.Волков, В.М.Цупко-Ситников, А.К.Чураков

ВЛИЯНИЕ КОРРЕЛЯЦИЙ ЗНАЧЕНИЙ ЭНЕРГИИ
ГАММА-ЛИНИЙ ЭТАЛОННЫХ ИСТОЧНИКОВ
НА РЕЗУЛЬТАТЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ КАЛИБРОВОК
В ГАММА-СПЕКТРОМЕТРИИ

*Направлено на XXX Совещание
по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра,
Ленинград, март 1980 г.*

1980

1. ВВЕДЕНИЕ

Методика определения энергий гамма-лучей с помощью полупроводниковых Ge(Li) -детекторов основана на сравнении аппаратных спектров исследуемого и эталонных образцов. Как правило, при этом по имеющемуся набору калибровочных точек проводится кривая "канал-энергия", по которой в дальнейшем восстанавливаются энергии исследуемых линий.

Значения энергий эталонных гамма-линий, как правило, не могут быть определены в прямых измерениях и получаются путем сравнения с известными абсолютными значениями. Большая часть существующих в настоящее время энергетических констант происходит от одного из двух известных значений: энергии аннигиляции электронно-позитронной пары /и вычисленной на ее основе энергии гамма-линии $411,795 \pm 0,007$ кэВ ^{198}Au / и энергии $K_{\alpha 1}$ - линии вольфрама ^{1/}.

Тот факт, что эталонные источники калибруются по одной абсолютной энергии, приводит к корреляции значений их энергий, которая должна учитываться при проведении калибровочных кривых и вычислении энергий и их погрешностей для исследуемых источников.

Особенно значительными корреляции будут в случае, если группа эталонных γ -линий калибруется в совместном эксперименте. Однако даже если в каждом эксперименте калибруется лишь одна эталонная гамма-линия, неопределенность в определении значения абсолютной константы приводит к корреляции между всеми значениями энергий гамма-линий, калиброванных по данному абсолютному значению.

Однако часто случается, что физику-экспериментатору бывает неизвестна ковариационная матрица значений энергий используемых у него калибровочных источников и он, естественно, предполагает их независимыми. В результате могут получиться неправильные значения энергий гамма-линий и их погрешностей.

Целью настоящей работы является анализ влияния корреляций значений энергий калибровочных источников на результаты калибровки. Анализ осуществляется с помощью численного эксперимента, в котором параметры детекторов и другие характеристики выбраны близкими к реальным величинам.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛНОЙ КОВАРИАЦИОННОЙ МАТРИЦЫ ПРИ КАЛИБРОВКЕ ЭТАЛОННЫХ ИСТОЧНИКОВ

Предположим, что мы определили энергии нескольких эталонных гамма-линий с помощью кристалл-дифракционного спектрометра, характеристику которого мы считаем линейной в пределах точности наших измерений. Калибровка будет производиться относительно одного из известных абсолютных значений, например линии $411,795 \pm 0,007$ кэВ ^{198}Au . Пусть шкала спектрометра имеет 1000 каналов и положение гамма-линии определено с точностью до 0,001 канала. Центр калибровочной гамма-линии находится в 1000-м канале, центры исследуемых эталонных линий - в каналах 100, 300, 500, 700, 900. Воспользовавшись методом наименьших квадратов $^{1/2}$, получим значение вектора коэффициентов калибровочной прямой $E(x) = \theta_{01} \cdot x + \theta_{02}$:

$$\vec{\theta}_0 = (\mathbf{A}_0^T \mathbf{R} \mathbf{A}_0)^{-1} \mathbf{A}_0^T \mathbf{R} \vec{E}_0 \quad /1/$$

Здесь \mathbf{A}_0 - конструкционная матрица вида

$$\mathbf{A}_0 = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1000 \end{bmatrix},$$

x_1 и x_2 - абсциссы точек, по которым проводится прямая, \mathbf{R}_0 - матрица, обратная ковариационной матрице значений энергий, в нашем случае:

$$\mathbf{R}_0 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2^2} \end{bmatrix},$$

$$\sigma_i^2 = D(E_{0i}) = \left(\frac{\partial E}{\partial x} \right)^2 \cdot \Delta x_i^2 + \Delta E_{0i}^2,$$

\vec{E}_0 - вектор значений энергий точек, по которым проводится прямая:

$$\vec{E}_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 411,735 \end{bmatrix}.$$

Энергии эталонных гамма-линий определяются из уравнения

$$\vec{E}_1 = \mathbf{A}_1 \vec{\theta}_0 = \begin{bmatrix} 41,1795 \\ 123,5385 \\ 205,8975 \\ 288,2565 \\ 370,6155 \end{bmatrix},$$

где \mathbf{A}_1 - конструкционная матрица вида

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \\ 1 & x_4 \\ 1 & x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 100 \\ 1 & 300 \\ 1 & 500 \\ 1 & 700 \\ 1 & 900 \end{bmatrix}.$$

Ковариационная матрица для \vec{E}_1 вычисляется по формуле переноса ошибок:

$$D(\vec{E}_1) = \mathbf{A}_1 D(\vec{\theta}_0) \mathbf{A}_1^T.$$

Здесь $D(\vec{\theta}_0)$ равна, как обычно в МНК:

$$D(\vec{\theta}_0) = (\mathbf{A}_0^T \mathbf{R} \mathbf{A}_0)^{-1} \quad /3/$$

Для того, чтобы представить масштаб корреляций между отдельными значениями энергий, приведем получившиеся значения $D(\vec{E}_1)$:

$$D(\vec{E}_1) = \begin{bmatrix} 0,063 & 0,16 & 0,25 & 0,35 & 0,44 \\ 0,16 & 0,45 & 0,74 & 1,04 & 1,33 \\ 0,25 & 0,74 & 1,23 & 0,72 & 2,21 \\ 0,35 & 1,04 & 1,72 & 2,41 & 3,10 \\ 0,44 & 1,33 & 2,21 & 3,10 & 3,98 \end{bmatrix} \times 10^{-5}.$$

3. ВЛИЯНИЕ КОРРЕЛЯЦИЙ НА РЕЗУЛЬТАТЫ КАЛИБРОВКИ

Для сравнения результатов, получающихся при калибровке с учетом и без учета корреляций между значениями энергий эталонных гамма-линий, проведем расчеты для каждой из этих ситуаций.

На спектрометре, имеющем определенную нелинейность /например, спектрометре с Ge(Li)-детектором/, мы получаем спектр, содержащий наряду с неизвестными и эталонные гамма-линии из набора E_1 . В качестве примера нелинейности возьмем нелинейность, подобную приводимой в работе $^{1/1}$. Положение каждой линии будет определяться ее энергией, нелинейностью и случайным отклонением. Эту зависимость можно записать в виде

$$x_i = x_i^0 + p(x_i) + \delta(x_i), \quad /4/$$

где x_i^0 - положение гамма-линии /в каналах/ в отсутствие нелинейности и статистической ошибки; мы возьмем для эталонных линий $\vec{x}^0 = \{200, 1000, 1800, 2600, 3400\}$, для исследуемых ли-

ний $\vec{x}^0 = \{500, 1200, 1900, 2600, 3300\}$, $p(x_i)$ - сдвиг положения гамма-линий вследствие нелинейности спектрометра, в нашем случае это полином с подобранными параметрами. $\delta(x_i)$ - случайное отклонение положения i -той гамма-линии - определяется как $\delta(x_i) = N_i \Delta x$ /здесь N_i - нормально распределенная случайная величина с единичной дисперсией, Δx - погрешность, с которой мы определяем положение гамма-линии/.

Процедура калибровки состоит из проведения по эталонным точкам кривой "канал-энергия" /в нашем случае характер нелинейности позволяет использовать для этого полином третьей степени/ и последующего восстановления по ней значений исследуемых гамма-линий.

Коэффициенты полинома определяются из выражения

$$\vec{\theta}_2 = (A_2^T R_2 A_2)^{-1} A_2^T R_2 \vec{E}_1. \quad /5/$$

Здесь, как и прежде, A_2 - конструкционная матрица:

$$A_2 = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_5 & x_5^2 & x_5^3 \end{bmatrix},$$

R_2 - в общем случае матрица, обратная ковариационной для \vec{E}_1 . Если мы исключаем возможность корреляций между значениями энергий эталонных линий, эта матрица принимает вид

$$R_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & & & & 0 \\ & \frac{1}{\sigma_2^2} & & & \\ & & \frac{1}{\sigma_3^2} & & \\ & & & \frac{1}{\sigma_4^2} & \\ 0 & & & & \frac{1}{\sigma_5^2} \end{bmatrix}, \quad /6/$$

где $\sigma_i^2 = D(\vec{E}_1)_{ii} + \left(\frac{\partial E}{\partial x}\right)^2 \cdot \Delta x_i^2$, Δx_i - погрешность определения положения i -той эталонной гамма-линии. Значения энергий исследуемых линий будут равны:

$$\vec{E}_2 = A_3 \cdot \vec{\theta}_2 = \begin{bmatrix} 72,06281 \\ 144,1281 \\ 216,1925 \\ 288,2558 \\ 360,3199 \end{bmatrix}.$$

Здесь A_3 - конструкционная матрица для положений исследуемых гамма-линий, аналогичная A_2 . Ковариационная матрица энергий исследуемых гамма-линий вновь вычисляется по формуле переноса ошибок:

$$D(\vec{E}_2) = A_3 D(\vec{\theta}_2) A_3^T. \quad /7/$$

Здесь $D(\vec{\theta}_2)$ - ковариационная матрица параметров калибровочного полинома:

$$D(\vec{\theta}_2) = q(A_2^T R_2 A_2)^{-1}, \quad /8/$$

q - остаточная сумма квадратов отклонений значений энергии эталонных точек от значений калибровочного полинома, отнесенная к числу степеней свободы задачи.

Погрешность определения энергий исследуемых гамма-линий выражается из диагональных элементов ковариационной матрицы:

$$\Delta E_{2i} = \sqrt{D(\vec{E}_2)_{ii}}. \quad /9/$$

Приведем полученные значения для случая, когда $\Delta x = 0,01$ канала:

$$\Delta \vec{E}_2 = \begin{bmatrix} 0,0014 \\ 0,0017 \\ 0,0023 \\ 0,0031 \\ 0,0042 \end{bmatrix}.$$

Теперь повторим все проведенные вычисления начиная с /5/ при использовании полной ковариационной матрицы для \vec{E}_1 , взятой из /2/. Тогда

$$R'_2 = (D(\vec{E}_1) + \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & & & & 0 \\ & \sigma_2^2 & & & \\ & & \sigma_3^2 & & \\ & & & \sigma_4^2 & \\ 0 & & & & \sigma_5^2 \end{bmatrix})^{-1}, \quad /10/$$

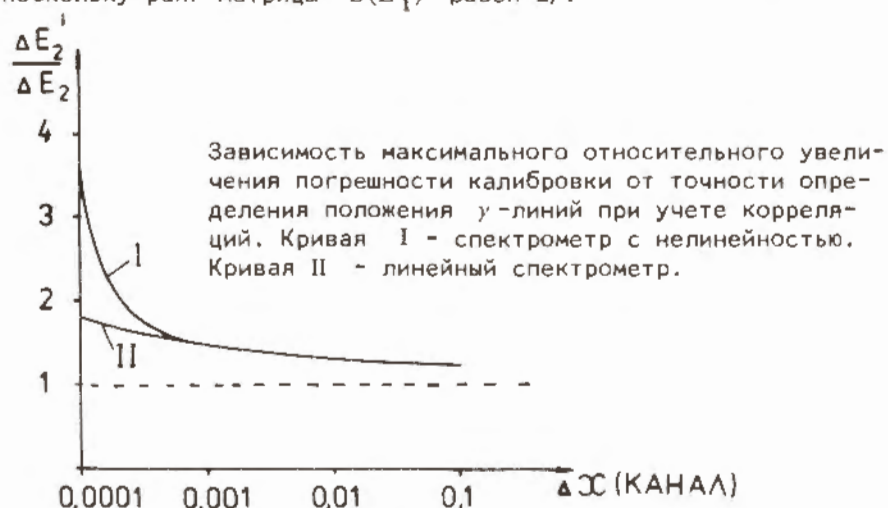
где $\sigma_i^2 = \left(\frac{dE}{dx}\right)^2 \cdot \Delta x_i^2$. Проведя вычисления, получим:

$$\vec{E}'_2 = A_3 \vec{\theta}'_2 = \begin{bmatrix} 72,0634 \\ 144,1288 \\ 216,1921 \\ 288,2547 \\ 360,3200 \end{bmatrix},$$

$$D(\vec{E}'_2) = A_3 D(\vec{\theta}'_2) A_3^T, \quad \Delta E'_2 = q \sqrt{D(\vec{E}'_2)_{11}},$$

$$\Delta E'_2 = \begin{bmatrix} 0,0018 \\ 0,0026 \\ 0,0035 \\ 0,0047 \\ 0,0058 \end{bmatrix}.$$

Мы видим, что как значения энергий исследуемых гамма-линий, E_2 и E'_2 , так и их погрешности, ΔE_2 и $\Delta E'_2$, отличаются друг от друга. Для того, чтобы определить, как влияет на это отличие точность, с которой определяется положение гамма-линий, мы провели расчет для величины Δx , меняющейся в пределах $0,001 \div 0,1$ канала. /Следует упомянуть, что при $\Delta x = 0$ задача вычисления R'_2 по формуле /10/ не имеет однозначного решения, поскольку ранг матрицы $D(E_1)$ равен 2/.



Результаты проведенных вычислений представлены на рисунке. На нем приведены также данные аналогичных вычислений, сделанные без учета нелинейности. Интересно, что хотя сами погрешности в этом случае становятся меньше, ход кривой относительного

увеличения ошибки в зависимости от Δx полностью повторяет /в диапазоне $\Delta x \geq 0,001$ / результаты, полученные для спектрометра с нелинейностью.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Суммируя полученные результаты, можно сказать, что знание ковариационной матрицы энергий калибровочных источников является желательным при проведении прецизионных измерений. В тех случаях, когда такую информацию получить невозможно, можно пользоваться приведенными в работе коэффициентами роста погрешности. В то же время следует отметить, что рассмотренный случай /эталонные линии калибруются в совместном эксперименте/, является с точки зрения коррелированности значений энергий эталонных гамма-линий наихудшим, поэтому во всех случаях приведенные коэффициенты дадут максимально возможное увеличение погрешности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Greenwood R.C., Helmer R.G., Gernke R.J. Nucl. Instr. and Meth., 1970, 77, p.141-159.
2. Бух К. Введение в теорию вероятностей и математическую статистику. ИЛ, М., 1951.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 февраля 1980 года.