

98-376



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

98-376

P10-98-376

Е.П.Жидков, Е.И.Литвиненко

О НЕКОТОРЫХ МЕТОДАХ АНАЛИЗА ДАННЫХ
НЕЙТРОННОГО РАССЕЯНИЯ*

Направлено в журнал «Computer Physics Communications»

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ 98-01-00190)

1998

Введение

В настоящее время исследования в физике конденсированного состояния методами нейтронного рассеяния являются одним из приоритетных направлений развития науки. Об актуальности этого направления свидетельствует наличие Государственной программы в России по исследованиям конденсированных сред с помощью нейтронов, а также большое число международных конференций и совещаний, посвященных задачам, решаемым с помощью нейтронного рассеяния, и наличие крупных проектов по новым нейтронным источникам (например, ANS в США) и международных ассоциаций, ставящих своей целью объединение усилий нейтронных центров разных стран по выполнению своих научных программ в условиях недостаточных финансовых и кадровых ресурсов (например, ENSA в Европе).

Настоящая работа посвящена некоторым актуальным вопросам анализа данных нейтронного рассеяния и созданию соответствующего программного обеспечения.

Постановка задачи

При измерениях на нейтронных спектрометрах традиционных типов (то есть обеспечивающих сканирование импульсного пространства) измеренный спектр после проведения некоторых рутинных преобразований (таких, как нормировка на мониторы, учет фонового шума, переход к физическим координатам \mathbf{Q} , ω) пропорционален свертке функции рассеяния с разрешающей (аппаратной) функцией спектрометра:

$$J(\mathbf{Q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{Q}', \omega') R(\mathbf{Q}-\mathbf{Q}', \omega-\omega') d\omega' dQ'_x dQ'_y dQ'_z. \quad (1)$$

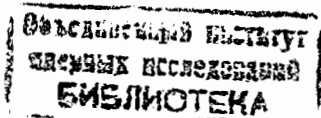
Здесь \mathbf{Q}, ω - значения переданного импульса и переданной энергии (в единицах постоянной Планка) при рассеянии нейтрона на образце. Функция (закон) рассеяния $S(\mathbf{Q}, \omega)$ зависит только от твердотельных свойств образца и связана с дифференциальным сечением рассеяния как:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{out}} = \frac{\sigma_s}{4\pi} \frac{k_{in}}{k_{out}} S(\mathbf{Q}, \omega)$$

где сечение рассеяния σ_s описывает взаимодействие между нейтроном и атомом, k_{in} - волновой вектор падающего и k_{out} - волновой вектор рассеянного нейтрона.

Часто вводится промежуточная функция рассеяния $I(\mathbf{Q}, t)$, связанная с функцией рассеяния (в литературе называемой также законом рассеяния или динамическим структурным фактором) одномерным преобразованием Фурье:

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = \hbar/2\pi \int I(\mathbf{Q}, t) e^{-i\omega t} dt. \quad (2)$$



Основной целью большинства экспериментов в физике конденсированного состояния является исследование свойств функции рассеяния данного материала при данных условиях - то есть нахождение $S(\mathbf{Q}, \omega)$ или $I(\mathbf{Q}, t)$ [10,11].

Для конкретных нейтронных инструментов уравнение (1) выглядит заметно проще соответственно типу проводимых измерений. В экспериментах по неупругому и квазиупругому рассеянию обычно производится сканирование по энергиям при фиксированном переданном импульсе, и уравнение (1) сводится к

$$J(\mathbf{Q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{Q}, \omega') R(\mathbf{Q}, \omega - \omega') d\omega' \quad (3)$$

с чисто параметрической зависимостью от \mathbf{Q} .

В экспериментах по упругому рассеянию переданная энергия равна нулю, и число переменных, по которым производится интегрирование, зависит от числа контролируемых в эксперименте компонент переданного импульса, обычно их одна или две. Следует отметить, что при упругом рассеянии на кристаллах функция рассеяния является дельта-функцией в точках брэгговских пиков, и измеренный спектр позволяет оценить разрешающую функцию инструмента.

Если считать, что аппаратная функция спектрометра известна экспериментатору, то задача анализа данных во многих экспериментах будет сведена к решению интегрального уравнения (3) типа свертки.

Традиционные подходы к решению задачи

Во многих работах [17,13,14,25], посвященных анализу данных экспериментов по нейтронному рассеянию, приводятся аппаратные функции соответствующих спектрометров, которые получены измерением спектров на совершенном упругом рассеивателе (например, ванадии). В большинстве приведенных в литературе случаях измеренная аппаратная функция хорошо приближается гауссианом или лоренцианом, то есть функцией вида:

$$y = \frac{2A}{\pi} \frac{w}{4(x - x_c)^2 + w^2}, \quad (4)$$

где w - FWHM (полная ширина на половине максимума), A - площадь пика, x_c - центр (фурье-образ лоренциана с центром в нуле $\sim e^{-w|t|}$).

Существуют также методы и программы для вычислений разрешающих функций проектируемых спектрометров, например, методы Натанса-Купера [23,25] и Поповичи [24] для трехосных спектрометров (TAS), используемые программой Rescal [22].

Традиционным и наиболее часто используемым методом анализа данных неупругого рассеяния является фитирование выбранной модельной функции для $S(\mathbf{Q}, \omega)$ с учетом формы разрешающей (аппаратной) функции. Выбираемая модель для $S(\mathbf{Q}, \omega)$ должна быть заданной аналитически функцией, параметры которой вычисляются при фитировании (3.). Во многих случаях модельные зависимости для $S(\mathbf{Q}, \omega)$ вытекают из физических соображений. Часто следует искать $S(\mathbf{Q}, \omega)$ как лоренциан (например, при трансляционной диффузии в молекулах), как дельта-функцию, их комбинацию (вращательная диффузия) и т.д. [12]. Особенно удобно, когда и аппаратная функция, и $S(\mathbf{Q}, \omega)$ являются лоренцианами (или гауссианами), так как свертка двух лоренцианов сама является лоренцианом (и то же самое для гауссианов). В подобных случаях

традиционный подход дает устойчивое к ошибкам в исходных данных приближение к искомому решению.

Однако могут встречаться ситуации, когда для определенной модели известна форма, но не известно число пиков в функции рассеяния. В этом случае простого применения традиционного подхода явно недостаточно. Для таких случаев хорошо зарекомендовал себя метод с применением байесовского анализа, который позволяет получить значение числа пиков известной формы, соответствующее максимальной вероятности реализации гипотезы о виде модели для функции рассеяния [13,14].

Подход с использованием быстрого преобразования Фурье

Существует также класс задач, в которых форму функции рассеяния невозможно предсказать теоретически. В таких случаях, вероятно, единственным способом решения задачи (3) является переход в пространство фурье-образов. При этом операция свертки переходит в операцию умножения соответствующих фурье-образов, и решение уравнения свертки сводится к вычислению обратного преобразования Фурье от соответствующего частного. Применение алгоритма быстрого преобразования Фурье (Fast Fourier Transform - FFT) [8] обеспечивает заметное повышение скорости счета. Такой подход очень привлекателен с точки зрения упрощения вычислений, однако крайне редко применяется при анализе данных нейтронного рассеяния. Серьезной причиной для этого служит, в частности, неустойчивость этого метода по отношению к ошибкам во входных данных.

Применение этого подхода для анализа нейтронных данных было предложено в работе [15]. В работе отмечалось, что конечная величина ошибки вычисления фурье-коэффициентов для всех гармоник и малая величина самих коэффициентов для высоких гармоник приводят к искажению результатов, и приведены рассуждения о том, что полезно производить обрезание фурье-коэффициентов на некоторой частоте.

В работе [16] (посвященной флуоресцентному рассеянию) приведены выражения для стандартных отклонений действительной и мнимой частей фурье-коэффициентов дискретного преобразования для случаев, когда число отсчетов в каждом канале удовлетворяет Пуассоновскому распределению с ожидаемым значением $\langle x_k \rangle$ и стандартным отклонением $\sigma_k = \langle x_k \rangle^{1/2}$ (что имеет место и для нейтронного рассеяния). При этом квадраты коэффициентов оказываются равными половине реальной части коэффициента при нулевой гармонике с коррекцией на половину реальной части коэффициента при гармонике с удвоенной частотой.

В работе [17] метод с использованием алгоритмов быстрого преобразования Фурье для решения уравнений типа свертки применен с целью сравнения возможностей по проведению экспериментов с неупругим рассеянием нейтронов для двух нейтронных спектрометров. При этом использовались формулы из [1] для стандартных отклонений фурье-компонент, обусловленных статистическими ошибками (шумами) в измеренных данных.

В работах [18-21] метод с использованием FFT применен для анализа динамики полимерных систем (ПММА). Применение этого метода было связано с возникновением проблем при попытке проанализировать данные с четырех различных спектрометров традиционным методом. При использовании FFT метода было обнаружено, что данные в t-пространстве ни на одном из спектрометров не фитируются как распадные экспоненты, как это ожидалось, и на одном из них - IRIS-

фитируются как растянутые экспоненты $e^{-(1/r)\beta}$. Этот факт подтвердил существование распределения вращательных частот и позволил использовать эту зависимость в исследовании моделей традиционным или байесовским методом. Данные с различных спектрометров хорошо согласовались между собой как $I(Q,t)$ (Q фиксировано). Независимо от выбранной модели $I(Q,t)$ позволяет определить так называемый упругий некогерентный структурный фактор $(EISF=I_e/(I_e+I_{qe}))$, числитель которого равен $I(Q,t \rightarrow \infty)$, знаменатель равен $I(Q,t=0)$.

Перечисленные работы (посвященные анализу данных неупругого рассеяния) показывают, что применение быстрого преобразования Фурье для решения задач анализа данных нейтронного рассеяния представляется перспективным, хотя и редко до сих пор применяемым, направлением.

Можно сделать предположение, что этот метод имеет достаточные перспективы и при применении в области нейтронной дифрактометрии. Основанием для такого утверждения является тот факт, что он имеет определенные приложения в кристаллографии [26], для которой написана специальная версия алгоритма FFT с учетом особенностей кристаллографических данных [27]. В кристаллографии исследуются главным образом данные рентгеновского рассеяния, однако дополнительно привлекаются и данные нейтронного рассеяния. Имеется программа моделирования вида измеренного спектра по функции рассеяния и аппаратной функции, задаваемой пользователем, на основе применения FFT метода [28]. В проектах рассматриваются также вопросы развития улучшенных вычислительных методов анализа данных рентгеновского рассеяния на основе комбинирования нескольких методов, включая FFT [29].

Описание метода решения уравнения свертки с применением алгоритмов регуляризации и быстрого преобразования Фурье

Следует заметить, что ни в одной из перечисленных в предыдущем разделе работ нет упоминания о применении или рассмотрении метода регуляризации по Тихонову [9], который сводит задачу построения приближенного решения, устойчивого к малым изменениям правой части, к нахождению так называемых регуляризирующих операторов и определению параметра регуляризации по дополнительной информации о задаче. Этот метод позволяет преодолеть неустойчивость подхода с применением быстрого преобразования Фурье по отношению к ошибкам во входных данных и вычислительным ошибкам.

Пусть в уравнении (3) на дискретном наборе равноотстоящих точек некоторого интервала известна (с некоторым шумом) левая часть $J(\omega)$ и разрешающая функция $R(\omega)$ и требуется получить приемлемую оценку закона рассеяния образца $S(\omega)$. В соответствии с методом регуляризации по Тихонову предлагается в качестве оценки точного решения задачи выбирать одно из набора регуляризованных решений, например, полученных в виде

$$S_{reg}(\omega, \alpha, p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R(t)R(-t)}{R(t)R(-t) + \alpha\omega^{2p}} \frac{J(t)}{R(t)} e^{-i\omega t} dt \quad (5)$$

где $R(t) = \int R(\omega) e^{i\omega t} dt$ и $J(t) = \int J(\omega) e^{i\omega t} dt$ - фурье-образы разрешающей функции и измеренного спектра, α - параметр, p - порядок регуляризации.

В работе [9] указывается, что регуляризованное решение $S_{reg}(\omega, \alpha, p)$ (5) минимизирует сглаживающий функционал

$$M^{\alpha p} [S, J] = \int (S \otimes R(\omega) - J(\omega))^2 d\omega + \alpha \int \omega^{2p} |S(\omega)|^2 d\omega \quad (6)$$

Предлагается несколько способов выбора оптимального параметра регуляризации, в том числе:

- 1) по невязке регуляризованного решения, то есть из условия $\rho(S^{reg} \otimes R, J_\delta) = \delta$ при $\rho(J, J_\delta) \leq \delta$, где δ - погрешность неточно заданной правой части задачи, ρ - выбранная метрика (в нашем случае это метрика пространства квадратично интегрируемых функций);
- 2) как квазиоптимальное значение, для которого достигается $\inf_{\alpha} \| \alpha dS^{reg} / d\alpha \|$; и другие.

Поскольку функции $R(\omega)$ и $J(\omega)$ заданы на дискретном наборе N равноотстоящих точек, алгоритм решения задачи выглядит следующим образом: с помощью процедуры быстрого преобразования Фурье вычисляются дискретные прямые преобразования Фурье:

$$F_l^R = FFT^{direct}(R_0, \dots, R_N), l=0, \dots, N$$

$$F_l^J = FFT^{direct}(J_0, \dots, J_N), l=0, \dots, N$$

В качестве FFT процедур можно использовать как стандартные процедуры в составе того или иного программного пакета, так и специально написанные программы, как, например, в работе [5]. Следует заметить, что при использовании FFT процедур первая половина результирующего набора (комплексных) значений содержит дискретное представление фурье-образа для набора положительных частот, а вторая половина - для набора отрицательных частот. Далее дискретное представление фурье-образа регуляризованного решения вычисляется по формуле:

$$F_l^{S^{reg}} = \frac{F_l^R F_{N-l}^R F_l^J}{F_l^R F_{N-l}^R + \alpha \omega_l^{2p} F_l^R} \quad (7)$$

где $\omega_l = 2\pi l / (x_{max} - x_{min})$, и затем само регуляризованное решение находится с помощью обратного преобразования Фурье:

$$S^{reg}_l = FFT^{inverse}(F^{S^{reg}}_0, \dots, F^{S^{reg}}_N), l=0, \dots, N$$

Из (5) и (7) легко видеть, что описанный метод получения регуляризованного решения для конкретных значений параметра и порядка регуляризации сводится к фильтрации высокочастотных компонент решения функцией, зависящей от ядра уравнения свертки. Для ядер типа гауссиана и лоренциана такой фильтр выглядит как сглаженная ступенька, причем чем меньше параметр регуляризации α , тем эта ступенька шире, а чем меньше порядок регуляризации p , тем более пологой она является.

Поскольку при нахождении фильтрующей функции используются вычисленные значения фурье-коэффициентов ядра уравнения (то есть разрешающей функции задачи), рассмотрим, насколько сильно в типичных для нас случаях эти значения могут отличаться от теоретических.

Вычислительные ошибки при вычислении фурье-коэффициентов

Рассмотрим два вида разрешающих функций - гауссиан и лоренциан. Проведя вычисления фурье-коэффициентов для различных значений ширины пика и нескольких

значений числа N точек на интервале, получаем результаты, представленные на рисунке 1(а,б,в,г). Из рисунков легко видеть, что численные значения модулей фурье-коэффициентов близки к теоретическим значениям для низких гармоник, но заметно отклоняются от них для более высоких гармоник, причем можно обнаружить зависимость младшего номера "плохой" гармоники от числа точек, приходящихся на ширину пика - рисунок 1(е,ф). Можно предположить, что при сравнительно большом числе точек на пике вычислительная ошибка возрастает вследствие суммирования с разными знаками нескольких близких по модулю сравнительно больших чисел - значений функции в области пика. Причем от этого рода ошибок не спасает переход к двойной точности, смена FFT программы или отказ от использования FFT алгоритма и прямое вычисление фурье-коэффициентов по формулам дискретного преобразования Фурье. С помощью полученных зависимостей можно предсказывать необходимость перехода к вычислениям с большим числом точек (например, с помощью искусственного увеличения рабочего интервала), если на ширину пика приходится более 10 точек данных.

Разумеется, эти ошибки могут исказить форму фильтрующей функции, добавляя к сглаженной ступеньке фильтра некоторый искривленный "хвост" (рисунки 2,б,7). Как следствие возникает необходимость использовать более высокие значения порядка регуляризации p для более эффективной фильтрации.

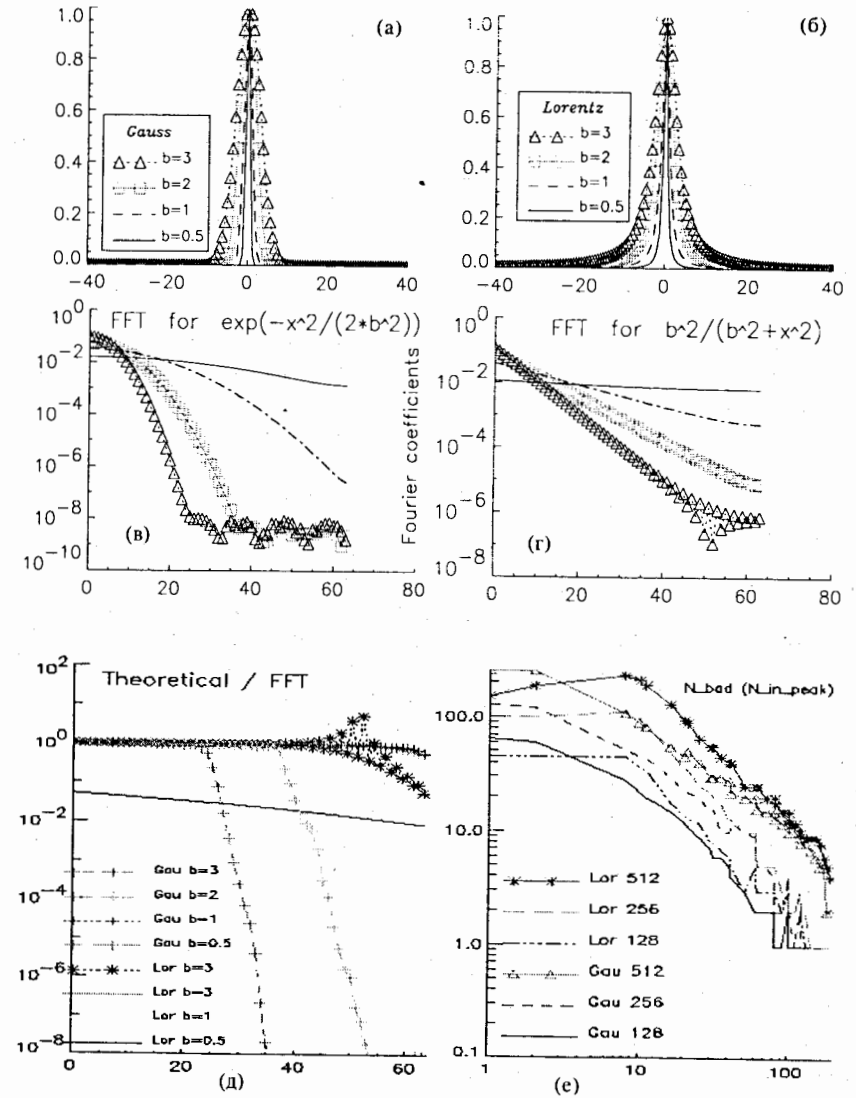


Рисунок 1 Характер вычислительных ошибок в фурье-коэффициентах
 1(а,б) - вид модельных кривых;
 1(в,г) - фурье-коэффициенты вычисленные по FFT ($N=128$);
 1(д) - отношения теоретических значений коэффициентов к вычисленным по FFT для рассмотренных кривых;
 1(е) - зависимость младшего номера "плохих" гармоник N_{bad} от величины $N_{in_peak}=N*B/H$, где B - ширина пика, H - полуширина интервала, N - число рабочих точек.

Расчетные программы и модели

Для вычисления решений уравнений типа (3) в качестве дополнения к программным средствам [1,2,4] разработана библиотека программ общего назначения на языке PV-WAVE. Основные процедуры пакета предназначены для вычисления регуляризованного решения и получения оптимальных по некоторым критериям значений параметров регуляризации α и p на выбранных диапазонах их изменения. Дополнительно в пакет вошли процедуры генерации исходных данных для набора типичных теоретических моделей и оценки качества полученного решения с точки зрения близости результата к исходным данным. Численные расчеты, проведенные для ряда теоретических моделей на компьютере Sun Sparcstation 20, позволили проанализировать различные варианты критериев выбора оптимальных параметров регуляризации и указать критерий, показывающий лучшие результаты при моделировании.

Разработанный пакет программ состоит из следующих основных процедур:

1. **deconv_tih** - процедура расчета регуляризованного решения $S(\omega)$ уравнения свертки $J(\omega) = \int R(\omega - \omega') S(\omega') d\omega'$ на дискретном наборе равноотстоящих точек при конкретных значениях параметров регуляризации α и p с применением алгоритма быстрого преобразования Фурье.
2. **deconv_scan** - процедура сканирования области значений параметров регуляризации $[\alpha_{\min} : \alpha_{\max}, p_{\min} : p_{\max}]$ с шагом 1 по p и с изменением α на порядок на каждом шаге по α для получения значений α и p , соответствующих наилучшему значению выбранного критерия отбора
3. **model_generate** - процедура вычисления различных вариантов модельных функций.

При тестировании алгоритмов и анализе критериев выбора оптимальных значений параметров в качестве функций разрешения брались гауссианы и лоренцианы различной ширины. В качестве модельных законов рассеяния использовались наборы гауссианов и лоренцианов с числом пиков (одинаковой ширины) от одного до 11. Вид модельных кривых в случае 11 пиков выбирался близким к экспериментальным данным, рассмотренным в работах [13,14] с применением байесовского анализа.

Модельные функции численно свертывались с разрешающей функцией, на полученную зависимость накладывался случайный нормально распределенный шум определенного уровня в пределах коридора статистических ошибок экспериментов по нейтронному рассеянию, и эти данные поступали на вход расчетной программы. Результаты расчета затем сравнивались с исходной моделью.

В качестве возможных критериев отбора оптимальных параметров регуляризации рассматривались следующие функционалы:

1. "Истинный" критерий - минимум нормы отклонения вычисленного решения S от задаваемой модели S_{theor} по области сканирования параметров - вычислялся для известных теоретических моделей как эталон для нахождения наилучшего решения:
$$\Omega_{true} = \sum_k (S_k - |S_{theor}_k|)^2 = Min.$$
2. Величина невязки - отклонения свертки полученного решения S с разрешающей функцией R от исходных данных правой части уравнения J - наиболее близкая к величине погрешности в исходных данных Ω_{err} :
$$\Omega_{conv} = \sum_k (J_k - S \otimes R_k)^2 \approx \Omega_{err} : |\Omega_{conv} - \Omega_{err}| = Min.$$
3. Различные показатели гладкости полученного решения - например, отношение суммы квадратов модулей высокочастотных компонент фурье-образа полученного решения к низкочастотным (граница была выбрана по 40-й гармонике).

4. Минимум нормы "отрицательности" полученного решения S - поскольку закон рассеяния обязан быть неотрицательным, то среди полученных решений естественно выбирать решения с минимальной нормой отрицательной части (как правило, отрицательная компонента связана с наличием осцилляций):
$$\Omega_{neg} = \sum_k (S_k - |S_k|)^2 = Min.$$

Результаты численного моделирования

При численном моделировании для различных теоретических моделей были получены зависимости $\Omega_{true}(\Omega_{other} = Best) / \Omega_{true}(\Omega_{true} = Min)$ от величины уровня шума с целью выявления критерия, дающего минимальные отклонения этой величины от 1 (в качестве Ω_{other} рассматривались критерии 2,3,4 и другие).

Анализ результатов численного моделирования показал, что наилучшие результаты с точки зрения близости регуляризованного решения к "точному" решению модели продемонстрировал следующий критерий выбора оптимальных параметров регуляризации - минимум нормы "отрицательности" решения Ω_{neg} среди всех точек или при условии, что норма статистических ошибок $\Omega_{err} = \sum_k (\Delta S_k)^2$ превышает минимум невязки по области сканирования $Min(\Omega_{conv})$, только для тех точек, для которых значение невязки Ω_{conv} не превышает величину Ω_{err} . Смысл этого критерия отбора следующий - в тех случаях, когда в группе полученных решений область изменения невязки Ω_{conv} охватывает значение нормы статистических ошибок Ω_{err} , это значение можно использовать для усиления основного критерия отбора параметров Ω_{neg} .

Результаты расчетов оптимальных регуляризованных решений по модели с набором из 11 гауссианов можно видеть на рисунках 3-5. Уровень шумов в области пика 25% соответствует числу отсчетов в максимуме экспериментального спектра около 200. Параметр регуляризации α варьировался в пределах от 10^{-4} до 10^{-12} , порядок регуляризации p - от 4 до 12. Из рисунков можно видеть, что представленные программы обеспечивают достаточное согласие с ожидаемыми результатами.

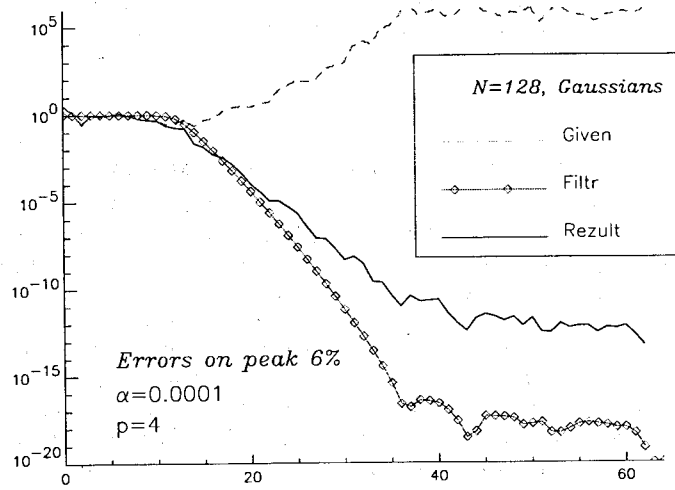


Рисунок 2. Отношение фурье-образов $F(J)/F(R)$ (given), фильтрующий множитель (filtr) и фурье-образ регуляризованного решения (rezult). $N=128$, модель с набором гауссианов.

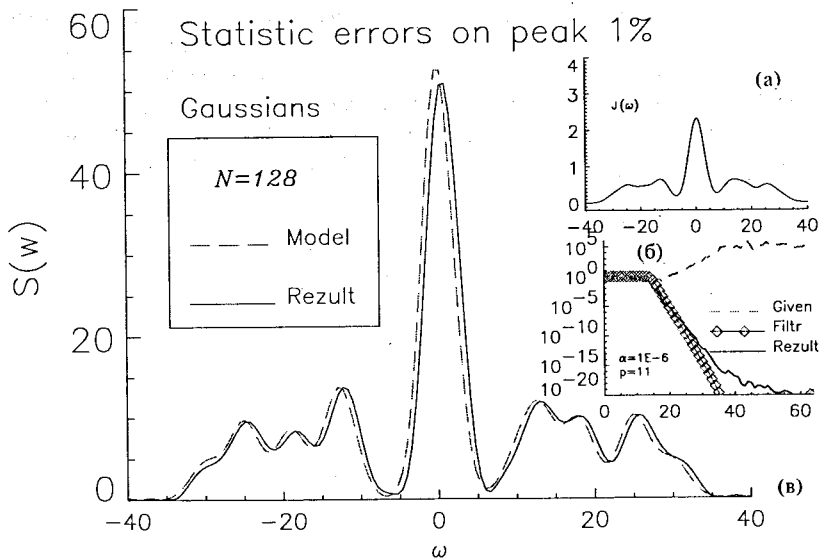


Рисунок 3. Результат вычисления регуляризованного решения для модели с набором гауссианов, $N=128$: (а) -зашумленная свертка модели с аппаратной функцией; (б) - фурье-коэффициенты ;(в) - Модель (до наложения шумов) и результат вычислений $S(\omega)$

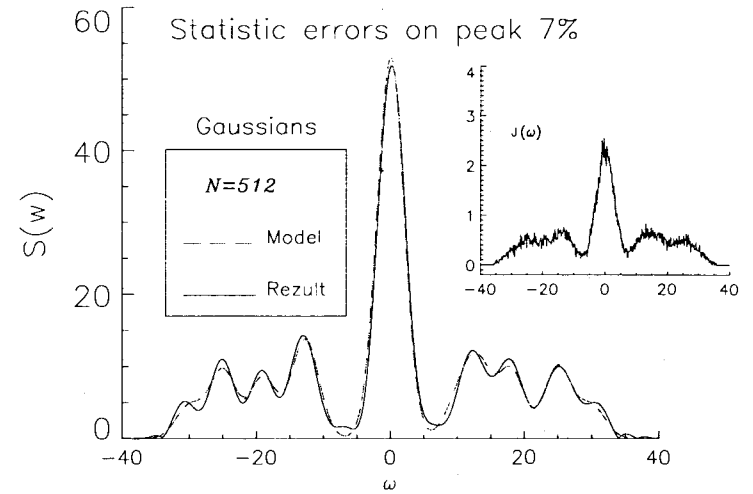


Рисунок 4. Регуляризованное решение для набора гауссианов. Ошибка в области пика 7%. $N=512$.

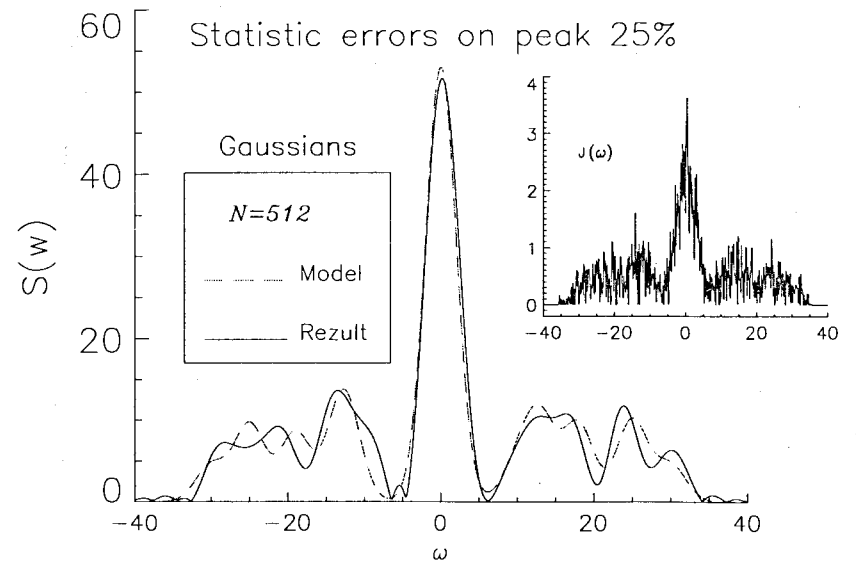


Рисунок 5. Регуляризованное решение для набора гауссианов. Ошибка в области пика 25%. $N=512$.

Уточнение регуляризованных решений.

Можно получить дальнейшее уточнение регуляризованных решений при использовании результатов работы [3]. В работе [3] было показано, что регуляризованные решения линейных операторных уравнений $AS = u$ с непрерывным оператором A в гильбертовом пространстве H , полученные вариационным способом со сглаживающим функционалом

$$M^{\alpha, p} [S, J] = \|AS - u\|^2 + \alpha \|LS\|^2, \quad (8)$$

где L - линейный оператор, такой что

$$\exists K > 0 : \forall S \in H \quad \|LS\| \geq K \|S\|,$$

могут быть представлены в виде:

$$S_\alpha = S_T + \sum_{k=1}^m C_k \alpha_k + O(\alpha^m), \quad (9)$$

где S_T - точное решение задачи.

Этот результат позволяет применить подход, известный как метод экстраполяции Ричардсона для получения приближенного решения более высокого порядка точности на основе решений с меньшим порядком точности [6,7].

Уточненное решение строится по формуле

$$S_{improved} = \sum_{k=1}^m v_k S^{\alpha_k}, \quad (10)$$

где

$$v_k = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^m \frac{(-\alpha_i)}{\alpha_k - \alpha_i} \quad \text{и}$$

$\alpha_1 > \alpha_2 > \alpha_3 > \dots > \alpha_m > 0$ - последовательность параметров регуляризации.

При использовании формулы (10) можно заметно улучшить качество решений, вычисленных для произвольных значений параметра регуляризации. Наши расчеты показали, что эффективно для рассматриваемых случаев взять $m=3$. Улучшение результата для оптимальных параметров регуляризации, полученных способом, описанным в предыдущем разделе, происходит на величины порядка от 1 до 30%. Примеры уточненных решений приведены на рисунках 8,9.

Заключение

Предложенный алгоритм позволяет повысить устойчивость метода решения уравнения типа свертки с использованием быстрого преобразования Фурье для достаточно широкого класса задач анализа экспериментальных данных нейтронного рассеяния. Использование уточненных регуляризованных решений повышает эффективность и точность расчетных алгоритмов. Разработанные программы являются несомненно полезным дополнением к возможностям программных средств для экспресс-анализа нейтронных данных на базе пакета PV-WAVE [1,2,4], работа над созданием и развитием которых ведется в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ и Институте Гана и Майтнер в Берлине.

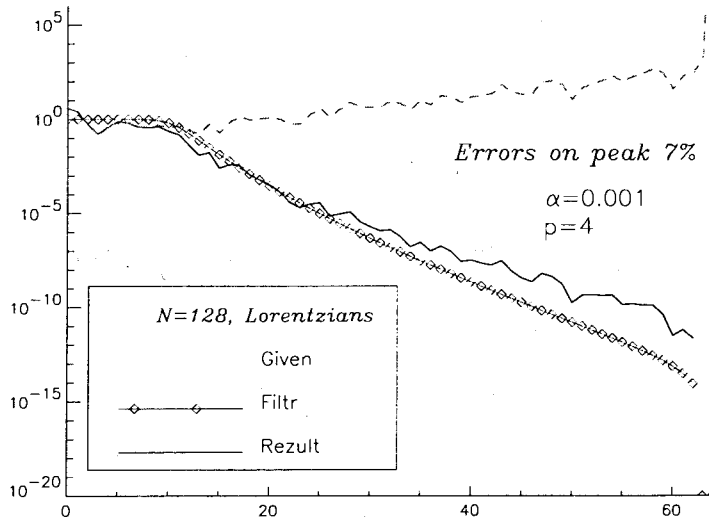


Рисунок 6. Отношение фурье-образов $F(J)/F(R)$ (given), фильтрующий множитель (filtr) и фурье-образ регуляризованного решения (rezult) для $\alpha=0.001$, $\rho=4$, $N=128$. Модель с набором лоренцианов.

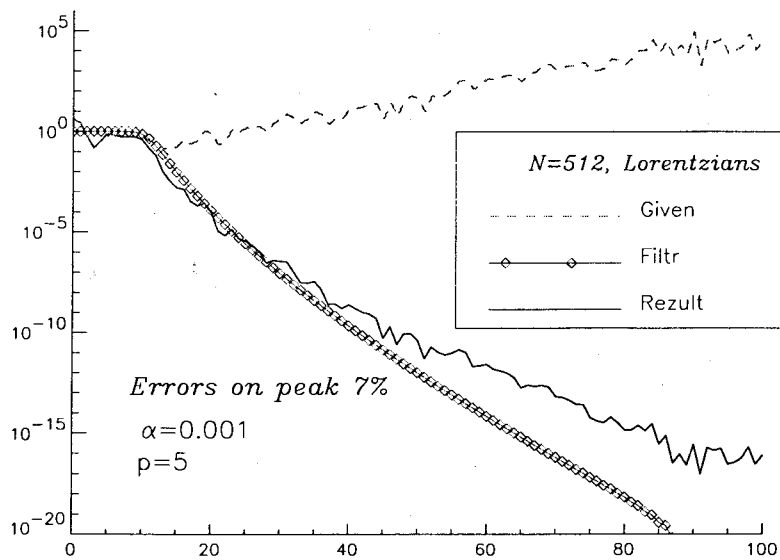


Рисунок 7. Отношение фурье-образов $F(J)/F(R)$ (given), фильтрующий множитель (filtr) и фурье-образ регуляризованного решения (rezult) для $\alpha=0.001$, $\rho=5$, $N=512$. Модель с набором лоренцианов.

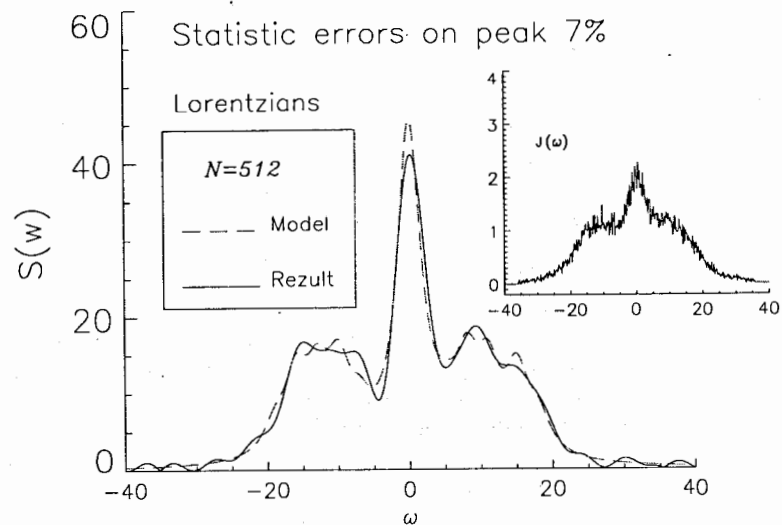


Рисунок 8. Уточненное решение для набора лоренцианов. Ошибка в области пика 7%. N=512.

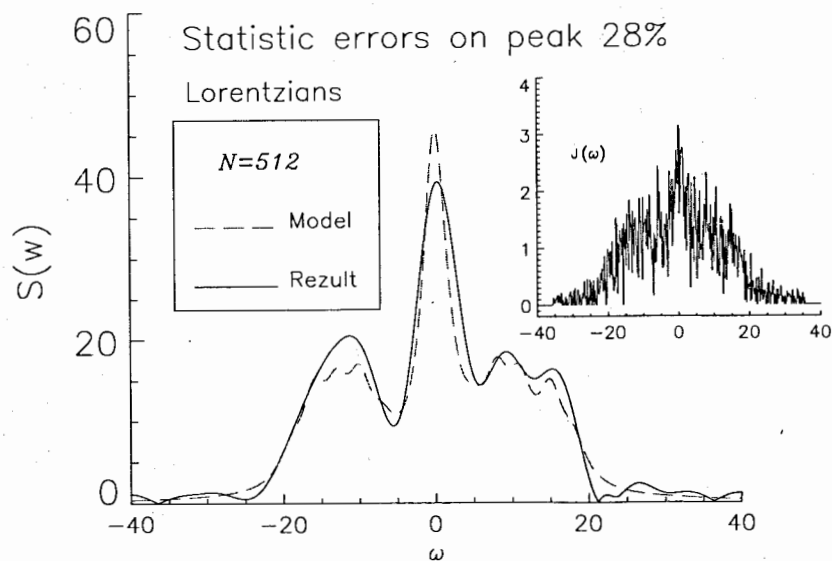


Рисунок 9. Уточненное решение для набора лоренцианов. Ошибка в области пика 28%. N=512.

Литература

1. E.I.Litvinenko, "PV-WAVE Based Tools for Visual Analysis of Neutron Scattering Data in FLNP", Proceeding of the Intern. Workshop DANEF' 97, Dubna 1997, E10-97-272, pp. 248-258
2. E.I.Litvinenko, "Interactive Data Analysis for Neutron Spectrometers Data Based on Visual Numerics' PV - WAVE Software Package", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A 389 (1997) 93-94
3. Akopyan V.P., Zhidkov E.P., Nguen Mong, Fedorov A.V., "Asimptotic Expansion of Regularized Solutions of Linear Incorrect Problems", Communications of the JINR, P5-81-793, Dubna 1981 (in Russian)
4. E.I. Litvinenko, "Current state and prospects of PV-WAVE based applications", Proc. of the Intern. Workshop NOBUGS'97, Argonne, USA, Dec. 1997, http://www.aps.anl.gov/xfd/bcda/nobugs/proceed/litvin_pv.html
5. Litvinenko E.I., Obukhov Yu.V., "A Computing Program of Sample Magnetic Moments Recognition for SQUID-Magnetometer Measurements", Communication of the JINR, P10 -94 - 44, Dubna 1994, (in Russian)
6. Марчук Г.И., Шайдулов В.В., "Повышение точности решений разностных схем", Москва "Наука", 1979
7. Richardson L.F., "The deferred approach to the limit. 1: Single lattice.", Philos. Trans. Roy. Soc., London, ser. A, 226, 1927, 299-349
8. Cooley, J. W. and Tukey, J. W., 1965, "An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series", Mathematics of Computation, 19, 90, pp. 297-301
9. А.Н.Тихонов, В.Я. Арсенин, "Методы решения некорректных задач", Москва, "Наука" 1974
10. R.Scherm, "Methods for Condensed Matter Studies with Neutrons", VII International School on Neutron Physics, Lectures, Vol.1, Dubna 1995, pp. 227-242
11. S.W.Lovesey, "Theory of neutron scattering from condensed matter", Clarendon Press, Oxford, 1984
12. G.J.Kearley, "Modern Chemistry with Neutron Scattering", VII International School on Neutron Physics, Lectures, Vol.1, Dubna 1995, pp. 333-339
13. D.S.Sivia, C.J.Carlike, "Molecular spectroscopy and Bayesian spectral analysis - how many lines are there?", J.Chem.Phys. 96(1), 1992, pp.170-178
14. D.S.Sivia, "From Bayes to tunneling spectroscopy", Physica B 202 (1994), pp.332-338
15. J.D.Bregman, F.F.M. de Mul, "Intermediate scattering functions obtained by fast Fourier transformation of cold neutron time-of-flight spectra", Nucl. Instr. & Meth., 93 (1971), pp. 109-118
16. U.P.Wild, A.R.Holzwarth, H.P.Good, "Measurement and analysis of fluorescence decay curves", Rev.Sci.Instrum. 48(12), 1977, pp.1621-1627
17. A.Heidemann, W.S.Howells, G.Jenkin, "Comparison of the performance of the backscattering spectrometer IN10 and the neutron spin-echo spectrometer IN11 on the basis of experimental results", Lecture Notes in Physics 128, Neutron Spin Echo Proceedings, Grenoble 1979, Springer-Verlag 1980, pp. 121-135
18. W.S.Howells, "The use of Fourier transforms in the analysis of QENS data", Physica B 226 (1996) pp.78-81
19. J.S.Higgins, G.Allen, R.E.Ghosh, W.S.Howells, B.Famoux, Chem.Phys.Lett. 49 (1977) 197
20. V.Arrighi, J.S.Higgins, A.N.Burgess, W.S.Howells, Macromolecules 28 (1995) 2745

21. V. Arrighi, J.S. Higgins, "Side group rotations in amorphous polymers", *Physica B* 226 (1996), pp.1-9
22. "Rescal for Matlab: a computational package for calculating neutron TAS resolution functions": <http://phonon.ssd.ornl.gov/~alan/matlab/rescal/rescal.htm>
23. M.J. Cooper and R. Nathans, *Acta Cryst.* A29, 160-169
24. M. Popovici, *Acta Cryst.* A31, 507 (1975)
25. M.J. Cooper and R. Nathans, *Acta Cryst.* 23, 357 (1967)
26. D. A. Langa (1996). *J. Appl. Cryst.* 29, 481-483
27. <http://www.dl.ac.uk/CCP/CCP4/main.html>
28. <http://www.esc.cam.ac.uk/teaching/paper/tpaper.html>
29. <http://www.rose.brandeis.edu/users/detector/deconvolute/convol.html>

Рукопись поступила в издательский отдел
24 декабря 1998 года.

Жидков Е.П., Литвиненко Е.И.

P10-98-376

О некоторых методах анализа данных нейтронного рассеяния

Работа посвящена рассмотрению методов решения уравнения типа свертки в задачах анализа данных нейтронного рассеяния и разработке соответствующего программного обеспечения. После обзора статей по соответствующей тематике дается описание метода регуляризации по Тихонову и подхода, позволяющего уточнить полученные приближенные решения, а также описание разработанных программ на языке PV-WAVE. Предложенный алгоритм позволяет повысить устойчивость метода решения уравнения типа свертки с использованием быстрого преобразования Фурье для достаточно широкого класса задач анализа экспериментальных данных нейтронного рассеяния. Использование уточненных регуляризованных решений повышает эффективность и точность расчетных алгоритмов.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И.М.Франка ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1998

Перевод авторов

Zhidkov E.P., Litvinenko E.I.

P10-98-376

Some Methods of Neutron Scattering Data Analysis

The paper is devoted to consideration of methods to solve deconvolution problems in neutron scattering data analysis and the development of corresponding software. The overview of corresponding papers is followed by the descriptions of Tikhonov's regularization method and technique for its further improvement, as well as the implementation of the approach in software programs written in PV-WAVE language. The proposed algorithm permits one to decrease the instability of solving the convolution equation method using Fast Fourier Transform for many problems of neutron scattering data analysis. The usage of improved regularized solutions increases the effectiveness and accuracy of calculating algorithm.

The investigation has been performed at the Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1998