

сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
Дубна

К40

РЗ-88-767

Ким Хон Сен\*, Ом Сан Ха\*

О ВЫВОДЕ УРАВНЕНИЯ  
КОРРЕКЦИИ СПЕКТРОВ  
И ОДНОМ МЕТОДЕ ЕГО РЕШЕНИЯ

---

\* Институт ядерной электроники Исследовательского центра атомной энергии Министерства атомной энергии КНДР

1988

В настоящей работе рассматривается метод обработки аппаратных спектров, полученных на многоканальном спектрометре.

Установлена зависимость, которая имеет место между эталонным и реальным спектрами при наличии дрейфа усиления и нуля спектрометра. Из полученной формулы выводится уравнение коррекции и предлагается один способ его численного решения.

## 1. СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ СПЕКТРАМИ, УЧИТЫВАЮЩЕЕ СМЕЩЕНИЕ КАНАЛА

При обработке аппаратных спектров на основе эталонного набора источников производится коррекция спектров на дрейф нуля и усиления, без которой невозможно гарантировать удовлетворительную точность анализа спектров.

К настоящему времени известно несколько работ, посвященных коррекции спектров<sup>/1-4/</sup>.

В работе<sup>/1/</sup> предложена следующая формула:

$$x_i = y_\ell (\ell = (1 + \epsilon) i + b) \quad (1)$$

в предположении, что изменение положений пиков в эталонной и реальной шкалах очень мало (там же предполагалось, что изменение положений пиков не превышает участка одного канала во всем рассматриваемом интервале). Здесь  $x_i$  — значение эталонного спектра в  $i$ -м канале;  $y_\ell$  — значение реального спектра в  $\ell$ -м канале, который подвергается обработке;  $\epsilon$  — дрейф усиления;  $b$  — дрейф нуля.

В работах<sup>/2,3/</sup> показано, что формула коррекции

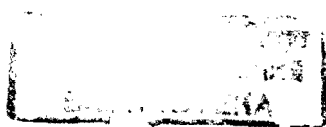
$$x_i = \frac{1}{1 - \epsilon} y_\ell \quad (2)$$

дает удовлетворительную точность.

В работе<sup>/4/</sup> рассматривались изолированные пики, и без строгого математического доказательства предполагалась формула

$$x_i = (1 + \epsilon) y_\ell, \quad (3)$$

где  $\ell = (1 + \epsilon)i$ . Однако на практике мы встречаемся не только с разрешенными, но и с неразрешенными пиками. Отсюда, естественно, возникает вопрос: ка-



кую для них формулу выбрать? Ответ на этот вопрос дает следующая теорема.

*Теорема.* Пусть функция  $s = \phi(t)$  имеет непрерывную производную первого порядка в диапазоне  $(-\infty, +\infty)$  и пусть  $x(t)$ ,  $y(s)$  — непрерывные функции в диапазоне  $(-\infty, +\infty)$ .

Тогда для того, чтобы условие

$$\int_t^{t+\delta} x(\xi) d\xi = \int_{\phi(t)}^{\phi(t+\delta)} y(\xi) d\xi \quad (4)$$

выполнялось при любых  $t$  и  $\delta > 0$ , необходимо и достаточно, чтобы равенство:

$$x(t) = \phi'(t) y(s) \quad (5)$$

имело место в рассматриваемых интервалах. Доказательство теоремы дано в работе /5/.

Перейдем теперь к рассмотрению определения функции  $s = \phi(t)$ . На рисунке изображено геометрическое представление отношения энергий к каналам. Предполагается, что смещение положения пиков обусловлено наличием дрейфа усиления и нуля спектрометра между двумя измерениями эталонного и реального спектров. Из рисунка ясно, что:

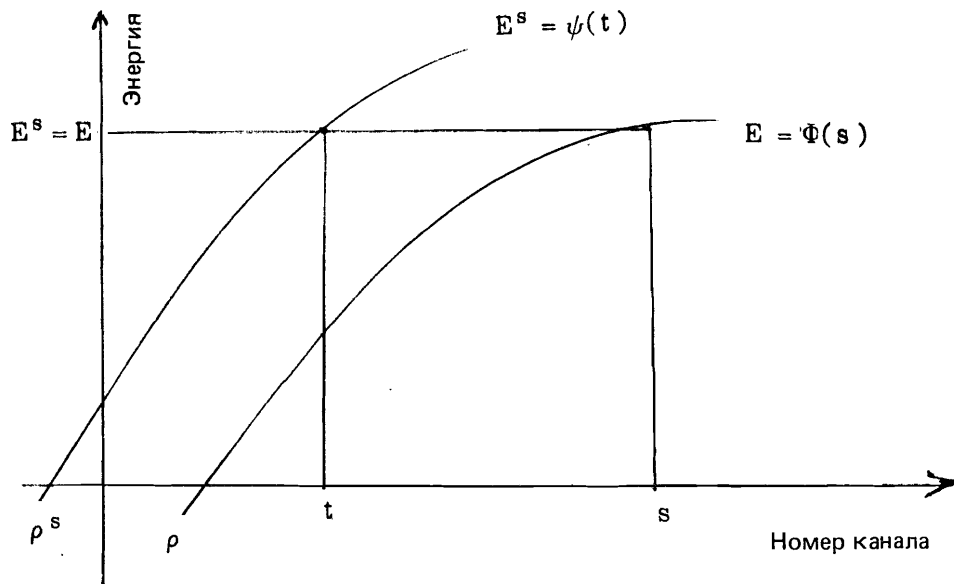


Рис. Зависимость энергии от номера канала.

$$\Phi(s) = \psi(t). \quad (6)$$

Тут же подчеркнем, что здесь  $\psi(t)$  означает энергию в эталонной шкале, а  $\Phi(s)$  — энергию в реальной шкале. Дифференцируя обе части равенства (6) по  $t$ , получим

$$\Phi'_s(s) S' = \psi'(t). \quad (7)$$

Пользуясь равенством (7), с учетом (6), легко получить выражение:

$$S = \frac{\psi(t)}{\Phi'_s(s)} + \int \frac{\Phi(s) \Phi''_s(s)}{[\Phi'_s(s)]^2} ds + C, \quad (8)$$

если  $\Phi'_s(s)$  не обращается в нуль в рассматриваемом промежутке.

В частности, предположим, что  $\psi(t)$  и  $\Phi(s)$  — линейные функции соответственно по своим аргументам  $t$  и  $s$ , т.е.  $\psi(t) = a^s t + b^s$ ,  $\Phi(s) = as + b$ . Тогда соотношению (8) можно придать и простую форму:

$$S = \frac{a^s}{a} t + \frac{b^s}{a} + C. \quad (9)$$

Если положить  $t = 0$ , то

$$S_0 = \frac{b^s}{a} + C,$$

отсюда

$$\Phi(s_0) = b^s + a \cdot C + b.$$

Но, с другой стороны, имея равенство  $\Phi(s_0) = \psi(0)$ , наконец, получаем

$$C = \frac{b}{a}.$$

Следовательно, подставляя  $-b/a$  в (9) вместо  $C$ , окончательно имеем следующее представление для  $S$ :

$$S = (1 + \epsilon) t - (1 + \epsilon) \rho^s + \rho, \quad (10)$$

где

$$\frac{a^s}{a} = 1 + \epsilon, \quad \rho^s = -\frac{b^s}{a}, \quad \rho = -\frac{b}{a}.$$

На деле формула (10) отнюдь не новая (см. /1/), хотя подход вывода ее отличен. Для дальнейшего изложения, однако, нам понадобится выражение (10).

## 2. ВЫВОД АППРОКСИМИРУЮЩЕГО УРАВНЕНИЯ КОРРЕКЦИИ СПЕКТРОВ

Мы ограничимся лишь простейшим случаем, когда  $\phi(t)$  является линейной функцией. Из равенств (5) и (10) вытекает следующее соотношение:

$$x(t) = (1 + \epsilon) y(s). \quad (11)$$

Если вместо непрерывной переменной  $t$  выберем только дискретные значения целого типа и обозначим  $\ell = (1 + \epsilon)i + b$ , то равенство (11) перейдет к форме:

$$x_i = F \cdot y_\ell, \quad (12)$$

где  $x_i = x(i)$ ,  $y_\ell = y(\ell)$ ,  $F = 1 + \epsilon$ . Разлагая  $y_\ell$  в ряд Тейлора, по этой формуле легко можно получить

$$x_i / F = y(q) + y'(\xi)(\ell - [q]), \quad (13)$$

$$\xi \in (\ell, [q]) \quad (N_1 \leq i \leq N_2),$$

где  $q = \ell + 0,5$ ;  $[q]$  — целая часть  $q$ , т.е. целая часть канала в реальной шкале;  $N_1$  — номер канала начала,  $N_2$  — номер канала конца рассматриваемого участка.

Далее заменим в (13)  $y(\xi)$  на  $y'(q)$  и проигнорируем погрешность от этой замены. Мы приходим к приближенному уравнению:

$$x_i / F - y'[q]iF - y'[q]b = y[q] - y'[q] \cdot [q], \quad (14)$$

$$(N_1 \leq i \leq N_2),$$

что и требовалось вывести. Очевидно, что  $x_i$  можно представить в виде

$$x_i = \sum_{j=1}^k a_{ij} m_j, \quad (15)$$

где  $a_{ij}$  — число импульсов в  $i$ -м канале, обусловленное  $j$ -м эталонным источником из радиоактивных нуклидов;  $m_j$  — относительная интенсивность  $j$ -го реального радиоактивного нуклида. Подставляя это выражение в (14), приходим к виду

$$\sum_{j=1}^k a_{ij} M_j - y'[q]iF - y'[q]b = y[q] - y'[q][q], \quad (16)$$

причем  $M_j = \frac{1}{F} m_j$  ( $j = 1, 2, \dots, k$ ). Для удобства обозначения полученное уравнение представим в виде:

$$\sum_{i=1}^p a_{ij} M_j = Y_i \quad (N_1 \leq i \leq N_2), \quad (17)$$

где

$$p = k + 2; \quad a_{i, k+1} = -y'[q]_i; \quad a_{i, k+2} = -y'[q];$$

$$M_{k+1} = F; \quad M_{k+2} = b; \quad Y_i = y[q] - y'[q][q],$$

причем предполагается  $N_2 - N_1 + 1 > p$ . Легко проверить, что если функция  $y$  имеет непрерывную производную второго порядка и  $h$  обозначает ширину одного канала, то погрешность метода решения уравнения (14) не хуже, чем  $O(h^2)$ , где  $H = h/2$ .

## 3. ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЕ СГЛАЖИВАНИЕ АППАРАТУРНЫХ СПЕКТРОВ

Одним из трудоемких процессов предварительной обработки является правильное сглаживание аппаратных спектров, полученных экспериментально на спектрометре. Проведение плавной кривой через полученные на спектрометре точки распределения существенно влияет на дальнейшую обработку спектра.

В работе /6/ показано, что при определении оптимального числа точек сглаживания сложных спектров целесообразно выбрать формулу сглаживания по пяти точкам:

$$\bar{y}_i = \frac{1}{35} (-3y_{i-2} + 12y_{i-1} + 17y_i + 12y_{i+1} - 3y_{i+2}), \quad (18)$$

где  $y_k$  — отсчет в  $k$ -м канале до сглаживания ( $k = i-2, i-1, i, i+1, i+2$ );  $\bar{y}_i$  — сглаженный отсчет в  $i$ -м канале ( $N_1 \leq i \leq N_2$ ). Однако проведение сглаживания по этой формуле иногда приводит сглаженные отсчеты к отрицательному значению, когда эксперимент проводился на спектрометре с высоким энергетическим разрешением. Для исключения возможности появления отрицательных значений в процессе проведения плавной кривой может быть использована формула сглаживания по трем соседним точкам:

$$\bar{y}_i = \frac{1}{3} (y_{i-1} + y_i + y_{i+1}). \quad (18')$$

По мере надобности можно несколько раз повторять процесс сглаживания.

#### 4. ПРИМЕНЕНИЕ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ К РЕШЕНИЮ УРАВНЕНИЯ КОРРЕКЦИИ

Приведенное выше уравнение коррекции (17) зачастую приводится к некорректно поставленной задаче, если к решению применить классический метод наименьших квадратов. В настоящее время опубликованы многие работы, посвященные решению некорректных задач. Можно сослаться на [7-13].

Будем решать уравнение коррекции методом неопределенных множителей Лагранжа, т.е. будем искать решение  $M$  уравнения (17), на котором функционал

$$Q = \sum_{i=N_1}^{N_2} W_i (f_i - y_i)^2 + \alpha \sum_{\ell=1}^P q_\ell (M_\ell - M_\ell^0),$$

$$f_i = \sum_{j=1}^P a_{ij} \cdot M_j$$
(19)

достигает своего минимума, где  $W_i$  — весовые функции;  $q_\ell$  — неотрицательные параметры;  $M_\ell^0$  — наперед заданные некоторые постоянные. Тогда  $M$  является решением уравнения Эйлера:

$$(A'WA + \alpha \theta E)M = A'WY + \alpha q M^0,$$
(20)

где  $A = (a_{ij})$  — матрица из  $(N_2 - N_1 + 1)$  строк и  $P$  столбцов;  $A$  — транспонированная матрица  $A$ ;  $W$  — диагональная квадратная матрица порядка  $(N_2 - N_1 + 1)$ , элементы главной диагонали которой суть  $w_{ij}$ ;  $E$  — единичная матрица порядка  $P$ ;  $M = (M_1, M_2, \dots, M_P)$ ;  $Y = (Y_{N_1}, Y_{N_1+1}, \dots, Y_{N_2})$ ;  $Q = (q_1, q_2, \dots, q_P)$ ;  $M^0 = (M_1^0, M_2^0, \dots, M_P^0)$ ;  $N_2 - N_1 + 1 \geq P$ .

Предполагается метод итерации для численного решения уравнения (20) в следующем виде:

$$[C(M^n) + \alpha QE]M^{n+1} = B(M^n) + \alpha QM^n, \quad (n = 0, 1, \dots),$$

где  $C(M) = A'WA$ ;  $B(M) = A'WY$ .

#### 5. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

Для проверки сходимости процесса (21) в качестве характерного примера выберем функции

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\left(\frac{t-a}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2},$$

$$y(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} e^{-\left(\frac{s-a_1}{\sqrt{2}\sigma_1}\right)^2},$$

где  $\sigma_1 = F\sigma$ ,  $a_1 = Fa + b$ .

(22)

Отсюда

$$y'(s) = \frac{(s-a_1)}{\sqrt{2\pi}\sigma_1^3} e^{-\left(\frac{s-a_1}{\sqrt{2}\sigma_1}\right)^2}.$$

Численные расчеты, если полагать  $\sigma=3$ ;  $a=10$ ;  $F=1,5$ ;  $b=0,3$ ;  $W_i=1$  (для всех  $i$ ), проводились в двух вариантах:

$$A - q_1 = 0, \quad q_2 = q_3 = 1,$$

$$B - q_1 = q_2 = q_3 = 1.$$

Результаты численных расчетов для вариантов А и Б приведены соответственно в табл.1 и 2. Итерационные процессы продолжались до выполнения условий, когда  $|F^{(n)} - F^{(n-1)}| \leq 10^{-3}$ ,  $|b^{(n)} - b^{(n-1)}| \leq 10^{-2}$ . Как видно из таблиц, при  $\alpha = 10^{-4}$  расчеты хорошо сходились; при  $\alpha = 5 \cdot 10^{-4}$ , хотя и заметна сходимость процессов, но скорость сходимости несколько ухудшалась в обоих вариантах.

В остальных случаях нет гарантии сходимости процесса, так что выбор подходящего значения  $\alpha$  все еще остается вопросом, потому что известные нам до сих пор способы определения значения  $\alpha$  слишком трудоемки для практических целей.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность И.М.Саламатину за редакцию текста работы.

Таблица 1. Численные результаты для варианта А

$\alpha$	Неизвестные	Число повторения итерации (n)																
		0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	18					
0	$M^{(n)}$	-	2,33	$2,41 \cdot 10^{-3}$	$-7,15 \cdot 10^{-4}$	$1,44 \cdot 10^{-4}$	$1,84 \cdot 10^{-4}$	$1,07 \cdot 10^{-4}$	$5,79 \cdot 10^{-6}$	$2,2 \cdot 10^{-6}$	-	-	-	-	-	-	-	
	$F^{(n)}$	1	-0,732	-0,478	-0,439	-0,379	-0,429	-0,242	-0,238	-0,24	-	-	-	-	-	-	-	
	$b^{(n)}$	0	38,18	35,69	36,77	37,03	37,16	36,94	37,93	38,90	-	-	-	-	-	-	-	
$10^{-5}$	$M^{(n)}$	-	1,56	-0,02	$1,8 \cdot 10^{-3}$	$3,4 \cdot 10^{-3}$	$3,4 \cdot 10^{-4}$	$-2,7 \cdot 10^{-3}$	$-3,0 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	-	-	-	-	-	-	-	
	$F^{(n)}$	1	0,24	0,13	0,12	0,16	0,25	0,5	0,68	0,81	-	-	-	-	-	-	-	
	$b^{(n)}$	0	19,8	23,9	26,02	27,2	27,8	27,9	28,1	28,2	-	-	-	-	-	-	-	
$10^{-4}$	$M^{(n)}$	-	0,896	0,711	0,686	0,678	0,673	0,671	0,669	0,668	0,668	-	-	-	-	-	-	
	$F^{(n)}$	1	1,096	1,318	1,414	1,454	1,475	1,485	1,491	1,494	1,496	1,497	-	-	-	-	-	
	$b^{(n)}$	0	3,716	2,168	1,235	0,795	0,575	0,476	0,398	0,364	0,346	0,335	-	-	-	-	-	
$5 \cdot 10^{-4}$	$M^{(n)}$	-	0,775	0,723	0,681	0,679	0,677	0,675	0,674	0,673	0,672	0,672	0,669	0,672	0,672	0,669	0,669	
	$F^{(n)}$	1	1,249	1,408	1,440	1,449	1,457	1,463	1,468	1,473	1,476	1,479	1,492	1,476	1,479	1,492	1,492	
	$b^{(n)}$	0	0,818	1,068	0,950	0,851	0,768	0,700	0,643	0,596	0,557	0,523	0,381	0,596	0,557	0,523	0,381	

Таблица 2. Численные результаты для варианта Б

$\alpha$	Неизвестные	Число повторения итерации (n)																
		0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	18					
0	$M^{(n)}$	1	2,33	$2,9 \cdot 10^{-3}$	$-7,15 \cdot 10^{-4}$	$1,4 \cdot 10^{-4}$	$-1,8 \cdot 10^{-4}$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
	$F^{(n)}$	1	-0,732	-0,478	-0,439	-0,379	-0,429	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
	$b^{(n)}$	0	38,18	35,69	36,77	37,03	37,16	36,94	37,93	38,90	-	-	-	-	-	-	-	
$10^{-5}$	$M^{(n)}$	1	1,56	-0,0182	$1,7 \cdot 10^{-3}$	$3,4 \cdot 10^{-3}$	$3,5 \cdot 10^{-4}$	$-2,7 \cdot 10^{-3}$	$-3,3 \cdot 10^{-4}$	-	-	-	-	-	-	-	-	
	$F^{(n)}$	1	0,245	0,134	0,125	0,156	0,250	0,500	0,688	-	-	-	-	-	-	-	-	
	$b^{(n)}$	0	19,77	23,97	26,02	27,20	27,76	27,99	28,12	-	-	-	-	-	-	-	-	
$10^{-4}$	$M^{(n)}$	1	0,897	0,711	0,687	0,678	0,673	0,671	0,669	0,669	0,668	0,668	-	-	-	-	-	
	$F^{(n)}$	1	1,096	1,318	1,414	1,454	1,475	1,485	1,491	1,494	1,496	1,497	-	-	-	-	-	
	$b^{(n)}$	0	3,720	2,171	1,237	0,796	0,575	0,461	0,398	0,364	0,346	0,336	-	-	-	-	-	
$5 \cdot 10^{-4}$	$M^{(n)}$	1	0,777	0,724	0,681	0,679	0,677	0,676	0,674	0,673	0,673	0,672	0,669	0,673	0,672	0,669	0,669	
	$F^{(n)}$	1	1,250	1,407	1,439	1,449	1,456	1,463	1,468	1,472	1,476	1,479	1,492	1,476	1,479	1,492	1,492	
	$b^{(n)}$	0	0,827	1,077	0,958	0,857	0,774	0,704	0,647	0,599	0,560	0,526	0,382	0,560	0,526	0,382	0,382	
$10^{-4}$	$M^{(n)}$	0	0,677	0,682	0,674	0,671	0,670	0,669	0,668	0,668	0,668	0,668	-	-	-	-	-	
	$F^{(n)}$	2	1,445	1,441	1,469	1,482	1,489	1,493	1,495	1,496	1,497	1,497	-	-	-	-	-	
	$b^{(n)}$	1	1,388	0,908	0,632	0,492	0,415	0,374	0,351	0,339	0,332	0,332	-	-	-	-	-	



## ЛИТЕРАТУРА

1. Schofeld E. et al. — *Nucl. Instr. and Meth.*, 1966, 45, p.1.
2. Егизаров Б.Г. и др. *Измерительная техника в инструментальном нейтронно-активационном анализе*. М.: Атомиздат, 1972.
3. Егизаров Б.Г. и др. — *ПТЭ*, 1970, № 3, с.134.
4. Зан Зия Хуа и др. *Рентгенофлуоресцентный анализ радиоактивных изотопов*. Пекин.: Атомиздат, 1981, с.229. (на китайском языке).
5. Ом Сан Ха, Ким Хи Вен. *О выводе уравнения для обработки спектров, учитывающей смещения канала*. *Атомная энергия*, 1987, Пхеньян, № 1, 3-4. (на корейском языке).
6. Sabitsky A., Golay M. — *J.E. Anal. Chem.*, 1967, 36, No.8, p.1623.
7. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. *Методы решения некорректных задач*. М.: Наука, 1979.
8. Гаджоков В. — *ПТЭ*, 1970, 5, с.82.
9. Александров Л. *Препринты ОИЯИ Р5-5136, Р5-5137*, Дубна, 1970.
10. Калиткин Н.Н. *Численные методы*. М.: Наука, 1978.
11. Васильев Ф.П. — *ЖВМ и МФ*, 1985, 25, № 4.
12. Арефьева М.В. — *ЖВМ и МФ*, 1985, 25, № 5.
13. Косачевская Л.Л. и др. *ЖВМ и МФ*, 1985, 25, № 1.

Рукопись поступила в издательский отдел  
26 октября 1988 года.

## ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика