

539.1
B67

МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО И СРЕДНЕГО СПЕЦИАЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ СССР

МОСКОВСКИЙ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

«Современное состояние методики эксперимента»

Н. Г. ВОЛКОВ

МЕТОДЫ АНАЛИЗА ЛИНЕЙЧАТЫХ ГАММА-
СПЕКТРОВ, ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ДЕТЕКТОРОВ

(Конспекты лекций)

МОСКВА — 1975

539.1
361

МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО И СРЕДНЕГО СПЕЦИАЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ СССР

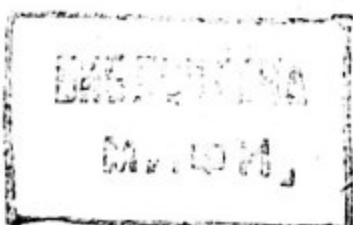
МОСКОВСКИЙ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ МЕТОДИКИ
ЭКСПЕРИМЕНТА

Н.Г.Волков

МЕТОДЫ АНАЛИЗА ЛИНЕЙЧАТЫХ ГАММА-
СПЕКТРОВ, ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ДЕТЕК-
ТОРОВ

(Конспекты лекций)



Москва - 1975

МЕТОДЫ АНАЛИЗА ЛИНЕЙЧАТЫХ ГАММА-
СПЕКТРОВ, ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ДЕТЕК-
ТОРОВ

Н.Г.Волков

1. Введение

Успехи последних лет в области измерения и анализа линейчатых γ -спектров в большой степени обязаны широкому внедрению в практику физического эксперимента полупроводниковых детекторов на основе германия, в которых чувствительная область получается путем дрейфа ионов лития в электрическом поле (германий-литиевых детекторов - ГЛД).

Можно сказать, что они произвели революцию в области гамма-спектрометрии. Значительно расширились возможности анализа сложных линейчатых спектров. Так, например, если с помощью сцинтилляционных спектрометров можно в лучшем случае анализировать спектры, содержащие до 10-12 линий в диапазоне 0,1 - 3 Мэв, то ГЛД позволяет анализировать спектры, содержащие до 200 линий, а в режиме многомерного анализа до 1000 линий.

Сложный характер спектров и большое их количество

приводят к необходимости использования вычислительных машин для их обработки. Действительно, на ручную обработку спектра, состоящего из 100 линий, требуется несколько недель, а скорость получения экспериментальных данных часто составляет несколько спектров в день.

При разработке методов и составления программ обработки линейчатых спектров требуется решить комплекс проблем, обеспечивающих:

- а) полную автоматизацию процесса обработки ;
- б) высокую степень надежности результатов ;
- в) малые затраты машинного времени .

2. Основные элементы анализа.

Существуют два различных метода анализа сложных линейчатых спектров : метод последовательного вычитания (известный также под названием "метода обтирки" или стриппинг-метод) и метод пиков.

Первый метод заключается в том, что для квантов с наибольшей энергией вычисляется площадь пика, затем функция отклика, соответствующая единичному потоку квантов данной энергии, умножается на величину этой площади и вычитается из измеренного спектра. После этого берется линия, соответствующая максимальной энергии в оставшемся аппаратурном спектре, и для нее повторяется та же процедура, и т.д.

Этот метод в свое время нашел широкое применение при анализе спектров, полученных с помощью сцинтиляционных спектрометров. Он, как правило, дает разумные результаты лишь в тех случаях, когда число линий в спектре невелико (3-5). Если число линий велико (т.е. в случае типичном для полупроводниковых спектрометров), то при последовательном вычитании вкладов линий, начиная с максимальной, происходит накопление ошибки.

Хорошее энергетическое разрешение полупроводниковых детекторов дает другую возможность анализа линейчатых спектров. Если мы выделим область спектра, где локализован какой-либо из пиков, то эта область состоит из 3-х компонент: 1) собственного пика, 2) комптоновского распределения от линий больших энергий, 3) фона постоянных частиц и импульсов шума (если таковые имеются). 2-е и 3-и компоненты в пределах выделенной области меняются слабо и это позволяет, отвлекаясь от их истинной природы, считать их фоном, сопутствующим данному пику. В дальнейшем мы будем употреблять термин "фон" в указанном смысле. Задача, таким образом, сводится к анализу пика, расположенного на некоторой "подложке" (фоне). Этот метод, называемый методом пиков, является наиболее распространенным, и настоящая лекция посвящена его анализу.

Задача обработки спектров методом пиков с помощью ЭЦВМ состоит из нескольких отдельных этапов.

Первый этап – идентификация пиков заключается в отыскании областей спектра, где расположены пики. Алгоритм поиска должен давать границы области, где локализован пик, а также грубые оценки положения максимума и площади пика, используемые в дальнейшем в качестве начальных значений при итерационных процедурах более точного их определения.

Второй этап – анализ мультиплетности пиков. Дело в том, что ^ввыделенной области могут располагаться несколько пиков, часто неразрешенных, и для дальнейшего анализа существенно знать их количество.

Третий этап заключается в точном определении площадей и положения их максимума. Обычно используются два способа определения этих параметров. Первый способ предусматривает предварительное вычитание фона и последующее определение параметров пика либо простым суммированием (т.е. определением площади пика и его центра тяжести сложением показаний в каналах анализатора с соответствующими весами), либо путем аппроксимации пика некоторой кривой, содержащей несколько неизвестных параметров, в числе которых имеются площадь пика и положение максимума, находимые методом наименьших квадратов.

Второй способ предусматривает аналитическое описание области пика суммой двух кривых, одна из которых относится к пику, другая – к фону. Неизвестные параметры, входящие в выражение этих кривых, отыскиваются методом наименьших квадратов.

Первый из способов несколько проще в реализации, но он непригоден в случае сложных спектров, состоящих из большого числа линий, налагающихся друг на друга. Причина заключается в том, что для идентификации фона требуется иметь участки аппаратурного спектра, свободные от пиков. В сложных спектрах такие участки часто отсутствуют.

Следующий, последний, этап обработки заключается в переходе от вычисленных значений площади пика и положения максимума, определенных соответственно в терминах скоростей счета и каналов, к тем же величинам, выраженным в единицах активности и энергии. Эта задача сводится к построению калибровочных кривых "канал-энергия" и "энергия-эффективность" на основе точек, полученных в экспериментах с изотопами, характеристики которых полностью известны, выполненных в тех же условиях, что и эксперименты с неизвестными излучателями.

Ниже последовательно рассматриваются отдельные этапы обработки.

3. Сглаживание спектров.

Эта предварительная операция имеет своей целью уменьшение статистических выбросов в аппаратурном спектре. Она заключается в замене отсчета в данном канале средневзвешенным значением отсчетов в каналах, прилегающих к нему (включая его самого) :

$$N_{Sm}(i) = \frac{\sum_{j=-k}^k W_j N_{in}(i+j)}{\sum_{j=-k}^k W_j} \quad (2)$$

где $N_{in}(i)$ - первоначальные значения отсчетов в каналах, $N_{Sm}(i)$ - сглаженные значения, W_j - веса, выбираемые обычно так, что W_j падает с ростом j и $W_j = W_{-j}$.

Довольно просто производится сглаживание с помощью метода наименьших квадратов. Для этого выбирается $2m + 1$ последовательных точек (каналов) спектра с центром в точке, в которой ищется сглаженное значение. Спектр на выбранном участке аппроксимируется полиномом Σ - того порядка (обычно 2-го или 3-го) и в качестве сглаженного значения принимается значение полинома в точке i . В итоге сглаженное значение N_{Sm} получается равным линейной комбинации исходных отсчетов :

$$N_{sm} = \frac{1}{A\hat{m}} \sum_{k=-m}^m C_{km} N_k \quad (3)$$

Достоинством этого способа сглаживания является, то, что просто вычисляются не только значения сглаженного спектра, но и его производные, которые принимаются равными производным соответствующего аппроксимирующего многочлена. Значение 1-й и 2-й производных бывает нужным при автоматическом поиске пиков. Все операции по реализации метода наименьших квадратов (т.е. по отысканию коэффициентов A_m и C_{km}) могут быть проделаны заранее, и при сглаживании целесообразно пользоваться готовыми коэффициентами.

Другой способ сглаживания заключается в применении преобразования Фурье. Если в исходном аппаратурном спектре независимую переменную (номер канала) интерпретировать как время, то операцию сглаживания можно представить как пропускание спектра через линейный фильтр, спектральная характеристика $L(\omega)$ которого не содержит высоких частот (рис.1). В этом случае Фурье-образы $F_{sm}(\omega)$ и $F_{in}(\omega)$ сглаженного и исходного (соответственно) спектров связаны соотношением :

$$F_{sm}(\omega) = L(\omega) F_{in}(\omega) \quad (4)$$

а сами спектры – соотношением:

$$N_{sm}(x) = \int k(x-s) N_{in}(s) ds, K(t) = \frac{1}{2\pi} \int L(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

(здесь для простоты записи вместо дискретных переменных – номеров каналов – записаны непрерывные переменные. В реальном случае интеграл должен быть заменен суммой). Таким образом, этот метод практически не отличается от простейшего способа сглаживания, разобранного выше. Однако, важным достоинством этого метода является возможность контроля искажений, возникших при сглаживании. При произвольном виде $L(\omega)$ гауссовский характер пиков не сохраняется. Исключение составляет функция $L(\omega) = e^{-\alpha\omega^2}$. Однако, если $L(0) = 1$, то площадь сглаженного пика остается равной площади исходного пика, что, разумеется, важно.

Функция $L(\omega)$ отлична от нуля в области $(0, \omega_0)$, что обеспечивает фильтрацию высокочастотных составляющих. Оптимальная величина ω_0 определяется условием $\Delta/2 \omega_0 \geq 1$, где $\Delta/2$ – ширина пиков на половине высоты. Следует обращать внимание на то, чтобы спад функции к нулю в области ω_0 не был резким. В противном случае в сглаженном спектре возникает тенденция к осцилляциям с частотой ω_0 .

4. Автоматический поиск пиков.

При разработке методов автоматического поиска (идентификации) пиков в той или иной форме используются различия в поведении пика, представляющего собой быстро меняющуюся функцию, отличную от нуля в малой области, и фона, являющейся гладкой медленно меняющейся функцией.

Поиск пиков – одна из простых процедур и не отнимает большого количества машинного времени. Основные трудности, с которыми иногда приходится здесь сталкиваться, таковы :

- 1) Слабые пики, высота которых лежит в пределах $2 - 3 \sqrt{N_i}$ (N_i – отсчет в максимуме пика) трудно отличать от флуктуаций фона.
- 2) Края комптоновских распределений, соответствующих мощным линиям, идентифицируются как пики. Их можно отличать от истинных, поскольку их положение по отношению к самим пикам известно. Однако, в этом случае возникает проблема идентификации линий, случайно попавших на край комптоновского распределения другого пика.
- 3) При большом количестве пиков, когда они налагаются друг на друга, трудно расставить их границы для последующей раздельной обработки.

Ниже рассматриваются основные методы поиска пиков.

a) Метод максимума

В этом методе число отсчетов в каждом канале сравнивается с числами отсчетов в соседних каналах. Принимается, что существует пик с максимумом в i -том канале, если число отсчетов $N(i)$ в этом канале одновременно удовлетворяет двум условиям

$$\begin{cases} N(i) > N(i-p) - k\sqrt{N(i)} \\ N(i) > N(i+p) - k\sqrt{N(i)} \end{cases} \quad (5)$$

где p и k подбираются экспериментально. Величина k в случае несглаженного спектра равна $\sim 2-3$, а в случае сглаженного спектра она существенно меньше и равна $\sim (2-3)(\sum W_i^2)/(\sum W_i)^2$, где W_i — веса используемые при сглаживании. Таким образом, сглаживание увеличивает чувствительность метода.

б) Метод первой производной

Если аппаратурный спектр представить как (непрерывную) функцию от номера канала, то по производной этой функции можно определять положение пиков. Действительно, в области пика производная спектра сначала принимает большое положительное значение, затем, меняя в некоторой точке знак, большое отрицательное значение, в то время, как в области вне пика величина производной всюду имеет не-большое отрицательное значение.

Этот факт можно использовать для идентификации пиков.

Для этой цели задаются два числа k_1 и k_2 и отыскиваются номера каналов, в которых одновременно выполняются следующие условия :

$$\begin{aligned} Y'_1(i-\rho) &> k_1 \\ Y'_1(i) &\approx 0 \\ Y'_1(i+\rho) &< -k_2, \end{aligned} \quad (6)$$

где $Y'_1(i)$ — оценка производной спектра в i -том канале.

в) Метод второй производной

Этот метод и его реализация аналогичны предыдущему методу тем, что оценка производится по второй производной , в качестве которой берется вторая конечная разность.

Считается, что существует пик с максимумом в i -том канале, если вторая разность:

$$Y_2(i) = N(i+1) - 2N(i) + N(i-1) \quad (7)$$

удовлетворяет условиям

$$\begin{aligned} Y_2(i-\rho) &> k_1 \\ Y_2(i) &< -k_2 \\ Y_2(i+\rho) &> k_3 \end{aligned} \quad (8)$$

Метод чрезвычайно чувствителен к статистическим флуктуациям в каналах, и поэтому вторые разности обычно вычисляются для предварительно сглаженных спектров или

производится сглаживание вторых разностей исходного спектра. В этом случае $Y_2(t)$ является функцией более сложного вида, нежели (7), и иногда называется обобщенной второй разностью.

Некоторым усовершенствованием этого метода является взятие обобщенной второй разности в виде линейной комбинации точек исходного спектра, в которой коэффициентами служат значения второй производной от гауссовой функции, имеющей полуширину такую же, как полуширина анализируемых пиков.

При выборе коэффициентов для сглаживания вторых разностей следует помнить, что чрезмерное стремление сгладить флюктуации приводит к сглаживанию самих пиков и уменьшению величины вторых производных и, тем самым, уменьшению чувствительности метода. По-видимому, вариант, предложенный выше, является оптимальным.

К достоинствам данного метода и отчасти метода первой производной следует отнести тот факт, что они могут отбрасывать края комптоновских распределений, которые другими методами идентифицируются как пики. Легко видеть, что вторая производная участка спектра, соответствующая краю комптоновского распределения в отличие от пика не содержит положительного выброса, что может служить критерием для его отбрасывания.

г) Метод сглаживания

Согласно этому методу производится сильное сглаживание спектра, которое практически не действует на фон и "размывает" пик.

Вычитая сглаженный спектр из исходного мы получаем характерный спектр, всюду близкий к нулю, кроме областей пиков, где имеется положительный выброс между 2-мя отрицательными. Дальнейшая идентификация пика осуществляется так же, как в методе второй производной.

Имеется также разновидность этого метода. Сначала производится сглаживание (несильное), затем сглаженный спектр сравнивается с исходным, и в тех точках исходного спектра, где его значение превышает значение сглаженного, производится замена его значения на значения сглаженного спектра.

Очевидно, в результате такой процедуры у пика будет "срезана" вершина. Повторяя описанную процедуру много-кратно, мы в конце концов получим фон. Вычитая фон из исходного спектра, получаем пики без фона, которые просто отыскиваются по отклонению значений от нуля.

Недостатком обоих вариантов метода сглаживания являются трудности идентификации пиков, сгруппированные в мультиплеты. Метод не пригоден для поиска пиков, расположенных вблизи краев комптоновских распределений.

5. Анализ мультиплетности пика

В процессе решения этой задачи подавляющее большинство исследователей пользуется экспериментально определенной зависимостью полной ширины на половине максимума (ПШПМ) от номера канала анализатора, которая предварительно вводится в ЭВМ, обрабатывающую спектр. Эта зависимость позволяет сделать вывод о том, что данный пик по ПШПМ не является синглетом. Так как этот критерий может пропустить мультиплет, представляющий собой сумму, например, 2-х пиков с резко отличающимися интенсивностями, применяются также различные тесты на степень ассиметрии пика. Ниже рассматриваются методы, позволяющие определить степень мультиплетности пика.

a) Линейный метод наименьших квадратов (МНК)

Этот метод хорошо работает в том случае, если известно, что данный мультиплет состоит только из некоторого (неизвестного) числа пиков, принадлежащих определенному набору излучателей. В этом случае счет в i -том канале спектрометра может быть представлен как:

$$C_i = \sum_j \alpha_j A_{ij} + \delta_i \quad (10)$$

где A_{ij} — экспериментально известный вклад j -го пика в i -й канал, приведенный к единице распада; α_j —

вклад j -го пика в мультиплет; δ_i — погрешность измерения.

Применяя МНК, мы можем найти значения α_j по их величинам определить наличие того или иного пика в мультиплете. В процессе дальнейшей обработки значения d_j могут быть использованы для определения площади отдельных пиков, составляющих мультиплет, в качестве начальных значений.

б) Метод Фурье-преобразования

Если представить мультиплет в виде непрерывной функции канала $C(N)$, то можно следующим образом написать уравнение, связывающее значения $C(N)$ со значениями "неразмытого" спектра, который представляет собой набор линий, составляющих мультиплет:

$$C(N) = \int_{N_{min}}^{N_{max}} k(N-E) A(E) dE \quad (11)$$

где $K(N-E)$ — так называемая аппаратурная функция анализатора, предполагаемая заранее известной. Она дает значение числа отсчетов в канале N при регистрации линии, центр которой находится в канале E , приведенное к единице распада. Уравнение (11) представляет собой уравнение Фредгольма 1-го рода типа свертки. Применяя к обеим частям уравнения (11) преобразование Фурье, полу-

чим:

$$\tilde{C}(\omega) = \tilde{K}(\omega) \cdot \tilde{A}(\omega) \quad (12)$$

где $\tilde{C}(\omega)$, $\tilde{K}(\omega)$ и $\tilde{A}(\omega)$ - Фурье-образы соответствующих функций. Искомый спектр находится в виде:

$$A(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{C}(\omega)}{\tilde{K}(\omega)} e^{i\omega E} d\omega \quad (13)$$

В дискретном случае, с которым мы сталкиваемся на практике, интегралы заменяются суммами.

Следует отметить, что решение (13) полученное таким способом, неустойчиво, т.к. функция $\tilde{K}(\omega)$ может принимать близкие к нулю значения, в результате чего функция $A(E)$ может иметь отрицательные значения и лишенные физического смысла осцилляции.

Вообще говоря, показано, что предварительное сглаживание спектра позволяет освободиться от отрицательных значений решения. Однако, сглаживание представляет собой пропускание спектра через некоторое ядро, которое, налагаясь на исходное ядро уравнения Фредгольма имеет максимум при некоторой частоте ω_0 . В решении $A(E)$ из-за этого возникают осцилляции с частотой близкой к ω_0 .

Избавиться от этих осцилляций и одновременно проявить структуру мультиплета удается путем использования

ядра, которое имеет Фурье образ вида :

$$f - (f^{-1}) C(\omega)$$

где $f > 1$, $C(0) = 1$, $C(\infty) = 0$. Это ядро уже не имеет выделенных частот и сцилляций не возникает. Однако, статистические флюктуации подавляются в меньшей степени по сравнению с предыдущим случаем.

в) Метод регуляризации

Как было указано выше, решение уравнения Фредгольма 1-го рода является неустойчивым, если не принимать специальных мер в процессе решения. Академиком А.Н.Тихоновым был предложен метод регуляризации, позволяющий получать устойчивое, или, как говорят регуляризованное решение уравнения Фредгольма 1-го рода. Этот метод позволяет различать пики равной интенсивности, находящиеся на расстоянии $(0,15 - 0,2)$ ПШПМ и обнаруживать слабые пики с интенсивностью 0,1 от интенсивности сильного пика, на хвосте которого они расположены.

6. Определение площади отдельных пиков
в терминах скоростей счета и положения их максимума в терминах
номеров каналов.

Как было отмечено в п. 2, существует 2 способа опре-

деления указанных параметров. Первый способ предусматривает предварительное вычитание фона и последующее определение параметров пика с использованием нелинейного МНК. Применение этого способа возможно в том случае, если имеются участки аппаратурного спектра свободные от пиков. Уровень фона определяется 2-мя методами: методом сглаживания, описанным в п.4, либо аппроксимацией спектра на участках, свободных от пиков, аналитическими функциями, параметры которых находят с помощью МНК. Обычно, в качестве функций, аппроксимирующих фон, выбираются полиномы 1-го или 3-го порядка.

Первый способ непригоден в случае сложных спектров, состоящих из большого числа линий, налагающихся друг на друга. В этом случае применяют 2-й способ, в котором участок спектра, содержащий пик, представляется в виде суммы 2-х функций, списывающих фон и пик. Параметры этих функций находятся с помощью МНК.

Общим для обоих методов является выбор функции, описывающей форму пика, в параметры которой входят площадь и положение максимума пика.

В выборе таких функций в настоящее время существует две крайности. Одни исследователи применяют для аппроксимации формы пика функции довольно простого вида, мотивируя это тем, что неточность аппроксимации формы пи-

ков в исследуемом спектре компенсируется за счет точно такой же неточности аппроксимации формы пиков в калибровочном спектре. Это не совсем правильно, так как форма пиков зависит от условий эксперимента, в частности, от загрузки, и эти условия могут быть разными для экспериментов с калибровочными и исследуемыми спектрами.

Другие исследователи в целях наилучшей аппроксимации формы пика применяют функции сложного вида. В случае пиков с хорошей статистикой это оправдывается, но приводит лишь к расходу машинного времени при обработке пиков с плохой статистикой, которые разумнее аппроксимировать простыми функциями, так как в этом случае любая выбранная форма пика не является статистически обеспеченной.

Довольно часто для аппроксимации формы пика используется гауссиан. Таким образом предполагается, что пик имеет симметричную форму относительно своего максимума. Это имеет место в спектрометрических трактах низкого качества, когда форма линии в основном определяется шумами детектора и усилителя и, наоборот, в трактах очень высокого качества, где искажения подавлены. В остальных случаях существует ряд причин, вызывающих асимметрию пика — правую или левую. Основные причины этого — процессы в детекторе и наложение импульсов друг на друга.

При попадании j — кванта в детектор, соответствую-

щий импульс дает вклад в фотопик в том случае, если данный j - квант полностью потратил свою энергию E_0 в объеме детектора. Если гамма-квант провзаимодействует с веществом детектора вблизи его края, то с некоторой вероятностью фотоэлектрон покинет детектор и потеряет в нем лишь часть своей энергии. Это приведет к появлению ступеньки слева от максимума пика. Подобная асимметрия пика связана также с неполным собиранием заряда в детекторе.

Кискажению формы линии также приводят наложения импульсов друг на друга в спектрометрическом тракте.

В результате действия указанных факторов характерными особенностями формы линии является наличие ступеньки в области пика (т.е. левое крыло пика приподнято над правым) и наличие асимметрии (левая часть пика более полого по сравнению с правой). Кроме того, характерно, что крылья распределения более вытянуты по сравнению с гауссианом, т.е. ^{оно} имеет положительный коэффициент эксцесса.

Наиболее общее выражение для формы линии имеет вид :

$$F(z, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) = f(z, \vec{a}) g(z, \vec{b}) + h(z, \vec{c}) \quad (14)$$

где z - номер канала, \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} - векторы, компоненты которых представляют собой варьируемые параметры. Функция $f(z, \vec{a})$ учитывает асимметрию, $g(z, \vec{b})$ - избыточный эксцесс и $h(z, \vec{c})$ - наличие ступеньки. В из-

вестных работах присутствуют либо все составляющие, либо только некоторые.

Функция $f(z, \vec{a})$ выбирается в виде линейной комбинации двух гауссианов:

$$f_1(z, \vec{a}) = \frac{a_1}{\sqrt{2\pi}a_2} e^{-\frac{(z-a_3)^2}{2a_2^2}} + \frac{a_4}{\sqrt{2\pi}a_5} e^{-\frac{(z-a_6)^2}{2a_5^2}} \quad (15)$$

в виде кусочной функции:

$$f_2(z, \vec{a}) = \begin{cases} \frac{a_1}{\sqrt{2\pi}a_2} e^{-\frac{(z-a_3)^2}{2a_2^2}}, & z \geq a_3 \\ \frac{a_4}{\sqrt{2\pi}a_5} e^{-\frac{(z-a_6)^2}{2a_5^2}}, & z < a_3 \end{cases} \quad (16)$$

Часто асимметрия учитывается путем домножения левого гауссиана на экспоненту:

$$f_3(z, \vec{a}) = \begin{cases} \frac{a_1}{\sqrt{2\pi}a_2} e^{-\frac{(z-a_3)^2}{2a_2^2}}, & z \geq a_3 \\ \frac{a_4}{\sqrt{2\pi}a_5} \cdot e^{-\frac{(z-a_6)^2}{2a_5^2}} \cdot e^{\frac{z-a_3}{a_6}}, & z < a_3 \end{cases} \quad (17)$$

Существует способ, когда асимметрия пика учитывается введением в обычный гауссиан зависимости $\sigma = \sigma(z)$, где $\sigma(z)$ подбирается так, чтобы правильно описать наблюдаемую асимметрию.

Избыточный эксцесс учитывается, как указывалось выше, введением в уравнение (14) множителя $g(z, \delta)$. Лучше всего себя зарекомендовала функция в виде полинома

$$g(z, \vec{\beta}) = 1 + \beta_1 (z - z_{\max})^4 + \beta_2 (z - z_{\max})^{12} \quad (18)$$

где z_{\max} — положение максимума пика. Удовлетворительные результаты дает также использование линейной функции, различной для левого и правого крыла распределения.

Наличие ступеньки учитывается функцией $h(z, \vec{c})$, которая обычно выбирается в виде ступенчатой функции, арктангенса, функции ферми, функции ошибок. Последняя является физически наиболее обоснованной, если предположить, что краевой эффект приводит к равномерному распределению амплитуд фотоэлектронов. Варьируемыми параметрами являются величина ступеньки и внутренние параметры указанных функций.

В результате участок спектра, содержащий несколько пиков, представляется в виде суммы функций вида (14), к которым добавляется функция, описывающая фон, выбираемая обычно в виде полинома небольшой степени.

В итоге оказывается, что участок, содержащий одиночный пик, описывается аналитическим выражением, включающим в себя до десяти и более параметров. Такого количества параметров обычно достаточно, чтобы описать практически любую форму линии. Поэтому все функции, представленные выше, как правило, дают хорошую аппроксимацию

цию в том смысле, что остаточная разность квадратов, деленная на число степеней свободы, близка к единице.

Однако большое количество параметров, особенно при анализе мультиплетов, приводит к затратам машинного времени, плохой сходимости итерационного процесса.

Как легко видеть, в качестве базисных функций для аппроксимации обычно выбираются довольно простые функции. Не исключено, что использование более изощренных функций, содержащее меньшее число неизвестных параметров, может привести к тем же результатам в смысле статистики, но к меньшим затратам машинного времени. В частности, опыт показывает, что некоторые из параметров, описывающих сложную форму линии не меняются от пика к пику и могут быть фиксированы заранее.

7. Определение интенсивностей и энергий пиков.

Эта задача, как было указано в п.2, сводится к построению калибровочных кривых "канал-энергия" и "энергия-эффективность" на основе точек, полученных в экспериментах с изотопами, характеристики которых хорошо известны.

В более общем виде эта задача формируется как задача аппроксимации набора точек, измеренных с погрешностями, некоторой функциональной зависимостью. Ниже рассматриваются методы аппроксимации. В основном, речь идет о

построении кривой "канал-энергия", но все сказанное в полной мере относится к построению кривой "энергия-эффективность".

a) Метод наименьших квадратов (МНК)

В ряде работ авторы аппроксимируют набор калибровочных точек полиномом, параметры которого находятся с помощью МНК. Однако, в подавляющем большинстве случаев этот метод приносит неудовлетворительные результаты. Дело в том, что нелинейность спектрометрического тракта, определяемая как отклонение калибровочных точек от некоторой прямой, проведенной с помощью МНК по этим точкам, носит весьма сложный характер, причем это отклонение значительно превышает погрешности калибровочных точек. Поэтому полиномы невысокого порядка не могут описать все особенности этой нелинейности и имеют систематические отклонения относительно набора калибровочных точек. Полиномы высокого порядка, коэффициенты которых определены по МНК, имеют лишние физического смысла oscillации, которые накапливаются в местах скопления калибровочных точек.

Некоторые исследователи применяют МНК, проводя на небольшом участке набора калибровочных точек (4-5 точек на интересуемом интервале) полином невысокого порядка, который, естественно, достаточно хорошо аппроксимирует

этот участок. Однако, аппроксимация полиномом по небольшому числу точек приводит к уменьшению точности по сравнению с тем случаем, когда удалось бы найти удачную аппроксимацию по всем точкам калибровочного набора.

б) Матричный метод.

Если $N_j(E)$ - энергетическая чувствительность спектрометра, а $N'_j(E)$ - отклик спектрометра, то между этими функциями существует соотношение:

$$N'_j(E) = M_{ij} N_j(E) \quad (19)$$

где M_{ij} - матрица нелинейных искажений. С помощью обратной матрицы M^{-1}_{ij} по измеренным спектрам $N'_i(E)$ находят скорректированные спектры. Использование такой матрицы не снимает основной проблемы, поскольку нахождение элементов матрицы требует того или иного способа интерполяции.

в) Нелинейный МНК и аппроксимация кусочно-гладкими функциями

В этом методе предлагаются 2 типа аппроксимирующих функций :

1) отношение полиномов с весовыми функциями :

$$F(t) = W(t) P_n(t) / Q_m(t) - S(t) \quad (20)$$

где $P_n(t)$ и $Q_m(t)$ – полиномы, соответственно, n -ой и m -ой степени. Их параметры находятся с помощью нелинейного МНК. $W(t)$ и $S(t)$ – некоторые функции.

2) Набор точек аппроксимируется кусочно-гладкой функцией $F(t)$, которая определяется между двумя узлами внутри заданного интервала, как полином фиксированной степени n . В узлах два полинома сшиваются так, чтобы $F(t)$ оставалась непрерывной.

Очевидно, что применение первого способа аппроксимации имеет, в общем, те же недостатки, что и любая полиномиальная аппроксимация, а также приводит к неопределенности в выборе функций $W(t)$ и $S(t)$. Применение 2-го метода дает лишенные физического смысла изломы в калибровочной кривой.

г) Метод сплайнов

Идея метода заключается в следующем. Между двумя соседними точками калибровочного набора проводятся полиномы 3-й степени, на параметры которых накладываются условия: значения полиномов, а также значения их 1-х и 2-х производных в соседних точках (точках сшивки) должны быть равны. Помимо этого задаются два краевых условия (обычно, на 1-е производные граничных полиномов).

Очевидно, что полученная таким образом функция (сплайн) пройдет точно по точкам калибровочного набора, в силу чего погрешность определения энергии по сплайну, связанная с погрешностью метода, будет превышать погрешность соседних калибровочных точек.

д) Сплайн – МНК метод

Согласно этому методу набор всех экспериментальных калибровочных точек разбивается на участков π (3–1 точки на участке), и на каждом участке проводится с помощью МНК полином невысокой степени (2–й или 3–й). В точках сшивки (общих для 2–х соседних участков) на параметры полиномов накладываются условия равенства их значений, а также значений 1–х (а в случае полинома 3–й степени – и 2–х) производных.

Авторы этого метода получили удовлетворительные результаты калибровки для различных спектрометров и для произвольного числа калибровочных точек.

Калибровочная кривая, проведенная таким способом, является гладкой кривой, проходящей в пределах ошибок через калибровочные точки, и это свойство сохраняется при любом характере нелинейности.

9. Заключение

Приведенный обзор показывает, что совокупность мето-

дов, разработанных к настоящему времени в области ма-
шинной обработки спектров, позволяет в целом успешно ре-
шать задачу анализа спектров. В принципе, можно умень-
шить погрешность в определении энергии квантов до 3-4
эв, а погрешность в определении площади пика до 1%. Эти
цифры сейчас не достигнуты, и для их получения помимо
технических мер (улучшение линейности и разрешения трак-
тов, уточнение характеристик реперов и т.д.) нужно улуч-
шить алгоритмы обработки. Сюда в первую очередь отно-
сятся такие проблемы как:

- 1) Корректный учет возможного дрейфа спектра в про-
цессе обработки ;
- 2) отыскание достаточно точных аппроксимирующих
функций с малым числом параметров ;
- 3) совершенствование методов анализа мультиплетов.

Л91170. Подп. к печати 13/У-75 г. Объем 2,0 п.л.

Заказ 773. Цена 20 к. Тираж 250.

Типография МИФИ, Каширское шоссе, дом 1.