



Научно-исследовательский институт
атомных реакторов им. В.И.Ленина

П-23(357)

Р.Б.Грабова

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА
РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ДЛЯ ЦЕЛЕЙ
АКТИВАЦИОННОГО
И РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО
АНАЛИЗОВ**

PC 4908849

**Методика
и техника
облучения**

Н А С Т О Я Щ Е Е И З Д А Н И Е Н И И А Р а

ЯВЛЯЕТСЯ самостоятельной, не всегда дублирующей в последствии в других изданиях ПУБЛИКАЦИЕЙ отдельных оригинальных научных трудов НИИАРа на которую можно ссылаться в других публикациях, указывая при этом авторов, наименование, порядковый номер (НИИАР, П-...), год и место издания (Димитровград).

ИЗДАЕТСЯ с целью более быстрой или более полной информации по сериям:

1. Ядерные реакторы
2. Методика и техника облучения
3. Радиационное материаловедение
4. Радиохимия
5. Ядерная физика
6. Вычислительная техника и электроника
7. Вычислительная математика и программирование
8. Информатика и управление

ПЕЧАТАЕТСЯ на ротапринтере НИИАРа тиражом 170 экз.

РАССЫЛАЕТСЯ в научные организации, научно-технические библиотеки и отдельным лицам на основе обмена и за плату.

Научно-исследовательский институт атомных реакторов
им. В.И.Ленина

НИИАР П-23 (357)

Р.Б.Грабова

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ
ДЛЯ ЦЕЛЕЙ АКТИВАЦИОННОГО
И РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗОВ

Димитровград - 1978

Р е ф е р а т

Изучается возможность применения метода регуляризации А.Н. Тихонова для обработки линейчатых спектров с целью улучшения разрешения. Получена оценка, связывающая улучшение разрешения с погрешностью задания исходных данных. Приводится алгоритм расчета погрешности обработки, который проверяется на результатах восстановления модельных спектров.

Приводятся результаты применения метода регуляризации для расшифровки сложных участков гамма-спектров активационного анализа. Предлагается использовать метод регуляризации для восстановления "истинной" формы рентгеновских линий по данным рентгеноструктурного анализа.



1. ВВЕДЕНИЕ

В практике физических измерений часто встречается ситуация, когда из-за недостаточного аппаратного разрешения теряется тонкая структура измеряемых распределений, в частности, спектров. В таких случаях возникает необходимость восстановления спектра по экспериментальным данным. Задача восстановления связана с решением интегрального уравнения Фредгольма 1-го рода:

$$\int_c^d K(x, s) \xi(s) ds = u(x), \quad (1)$$

где

$u(x)$ – заданная функция, описывающая экспериментальный спектр;

$K(x, s)$ – заданная функция, описывающая аппаратное уширение, аппаратная функция;

$\xi(s)$ – функция, описывающая искомый, истинный спектр;

(c, d) – интервал, на котором восстанавливается спектр $\xi(s)$.

Приближенные устойчивые решения уравнения (1) могут быть получены методом регуляризации А.Н.Тихонова [1]. Этот метод обычно используется для восстановления непрерывных спектров, поскольку позволяет получать достаточно гладкие решения уравнения (1).

Гамма-спектры активационного анализа, получаемые с помощью полупроводниковых детекторов, и угловые рас-

пределения линий на рентгенограммах кристаллов можно рассматривать как линейчатые спектры, поскольку, за исключением фона, они состоят из отдельных линий, естественная ширина которых меньше или сравнима с аппаратным уширением. При математической обработке гамма-спектров активационного анализа возникает задача расшифровки сложных участков спектра, содержащих неразрешенные линии – мультиплеты. Эта задача может быть решена методом восстановления спектра. Рентгеноструктурный анализ облученных кристаллов ставит задачу определения истинной формы рентгеновских линий, обусловленной радиационными повреждениями кристаллической решетки. Метод восстановления, позволяющий исключить аппаратное уширение, может быть использован для решения этой задачи. В данной работе приводятся результаты применения метода регуляризации для решения задач восстановления в активационном и рентгеноструктурном анализе.

2. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ДЛЯ ВОССТАНОВЛЕНИЯ СПЕКТРОВ

Задача восстановления спектра по экспериментальным данным относится к классу некорректно поставленных задач: её решение неустойчиво по отношению к малым погрешностям в правой части уравнения (1). Обычно правая часть уравнения $u(x)$ задается набором экспериментальных точек, например, числами отсчетов в каналах анализатора. При этом погрешность задания исходных данных определяется величиной среднеквадратичного отклонения:

$$\delta = \left[\frac{b-a}{n} \sum_{i=0}^n (\Delta u_i)^2 \right]^{1/2}, \quad (2)$$

где
 (a, b) – интервал, на котором определен экспериментальный спектр;

$1+n$ – число экспериментальных точек;

Δu_i - среднестатистическая погрешность отсчетов в i -м канале.

Неустойчивый характер решения выражается в том, что при численном решении уравнения получаются сильно осциллирующие функции, не имеющие ничего общего с искомой функцией $z(s)$. Метод регуляризации позволяет получать приближенные устойчивые решения уравнения (1), которые сходятся к точному при $\delta \rightarrow 0$. Это достигается тем, что задача (1) сводится к решению интегродифференциального уравнения [1]:

$$\int_c^d \bar{K}(s,t)z(t)dt + \alpha \left\{ \frac{d}{ds} [q_1(s) \frac{dz}{ds}] - q_0(s)z(s) \right\} = b(s), \quad (3)$$

решения которого удовлетворяют заданным граничным условиям: $z(c) = 0, \quad z(d) = 0$.

Здесь $q_0(s)$ и $q_1(s)$ - заданные неотрицательные функции;

α - параметр регуляризации, положительное число;

$$\bar{K}(s,t) = \int_a^b K(x,s)K(x,t)dx; \quad (4)$$

$$b(s) = \int_a^b K(x,s)u(x)dx. \quad (5)$$

Для численного решения уравнения (3) на ЭВМ его обычно заменяют системой конечно-разностных уравнений, которые строятся на дискретных сетках аргументов x и s . Экспериментальный спектр $u(x)$ задается в точках

$$x_i = a + h \cdot i, \quad (6)$$

где $i = 0, 1, \dots, n$, $h = \frac{b-a}{n}$ - ширина канала измерительного устройства;

искомый спектр $z(s)$ определяется в точках

$$s_j = c + h_1 \cdot j, \quad (7)$$

где $j = 0, 1, \dots, m$, $h_1 = \frac{d-c}{m}$, m — число точек, причем всегда $m \leq n$.

В конечно-разностной аппроксимации уравнение (3) с учетом (4), (5) сводится к системе $(m-1)$ линейных алгебраических уравнений, которую удобно записать в матричной форме:

$$A_\alpha z = (\tilde{A}A + \alpha Q)z = \tilde{A}u, \quad (8)$$

где координаты векторов z, u и элементы матриц A, \tilde{A}, Q определены соотношениями:

$$z_j = z(s_j),$$

$$u_i = u(x_i),$$

$$A_{ij} = K(x_i, s_j) h_1 \Sigma_j,$$

$$\tilde{A}_{ij} = K(x_j, s_i) h_1 \Sigma_j,$$

$$Q_{ij} = q_\alpha(s) \delta_{ij} + \frac{1}{h_1^2} \left[q_1(s_i + \frac{h_1}{2}) (\delta_{ij} - \delta_{i,j-1}) + q_1(s_i - \frac{h_1}{2}) (\delta_{ij} - \delta_{i,j+1}) \right],$$

δ_{ij} — символ Кронекера;

Σ_j — коэффициенты формулы приближенного интегрирования, по которой интегралы в (3), (4), (5) заменяются суммами.

При $\alpha = 0$ система (8) сводится к системе уравнений, получаемой методом наименьших квадратов. Дополнительный член с множителем α является стабилизирующей добавкой, обеспечивающей устойчивость приближенного решения. В матричной форме решение уравнения (8) примет вид

$$z_\alpha = A_\alpha^{-1} \tilde{A}u, \quad (9)$$

где A_α^{-1} — матрица, обратная матрице A_α .

В регуляризованном решении \tilde{x}_α величина параметра α должна быть согласована с погрешностью задания исходных данных δ . Наиболее употребительным способом определения α является выбор по невязке, которая вычисляется следующим образом:

$$\rho(\alpha) = \left[h \sum_{i=0}^n (A \tilde{x}_\alpha - u)_i^2 \right]^{1/2}. \quad (10)$$

В качестве искомого значения α_n берется такое, для которого невязка равна погрешности измерения δ , т.е. α_n определяется из уравнения

$$\rho(\alpha) = \delta. \quad (11)$$

Поскольку невязка является монотонной возрастающей функцией α , то уравнение (11) имеет единственный корень, что обеспечивает однозначность выбора α_n [2]. Решение \tilde{x}_{α_n} , соответствующее выбранному значению α_n , описывает восстановленный спектр.

3. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ РАЗРЕШЕНИЯ

Если линейчатый спектр измеряется при аппаратурном уширении, существенно превышающем естественную ширину линий, то форма линий экспериментального спектра целиком определяется аппаратной функцией. Соответствующий истинный спектр в этом случае можно описать набором δ -функций. Сведение задачи восстановления (1) к задаче (3) предполагает, что решения ищутся в классе гладких функций, непрерывных до первой производной включительно. Поэтому при восстановлении линейчатого спектра методом регуляризации получается не набор δ -функций, а спектр, состоящий из линий более узких, чем линии экспериментального спектра. Таким образом, применение метода регуляризации приводит к улучшению разрешения в обрабатываемом спектре. Оценим улучшение разрешения отношением полуширин линий в восстановленном и экспе-

риментальном спектрах. Предположим, что аппаратная функция описывается гауссовым распределением с дисперсией σ :

$$K(x, s) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} e^{-\frac{(x-s)^2}{2\sigma^2}}. \quad (12)$$

Рассмотрим две линии, имеющие одинаковую интенсивность I , одна из которых представляется δ -функцией и относится к истинному спектру:

$$\tilde{x}(s) = I \delta(s - s_0), \quad (13)$$

другая является линией восстановленного спектра и описывается гауссовым распределением с дисперсией σ_1 :

$$\tilde{x}(s) = \frac{I}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} e^{-\frac{(x-s_0)^2}{2\sigma_1^2}}. \quad (14)$$

В экспериментальном спектре с аппаратной функцией (12) линия (13) будет представлена функцией

$$u(x) = \frac{I}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-s_0)^2}{2\sigma^2}}. \quad (15)$$

Свертка функций (13) и (14) представляется выражением

$$\tilde{u}(x) = \int_c^d K(x, s) \tilde{x}(s) ds = \frac{I}{\sqrt{2\pi}\sigma} \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon^2}} e^{-\frac{(x-s_0)^2}{2\sigma^2(1+\varepsilon^2)}}, \quad (16)$$

где $\varepsilon = \frac{\sigma_1}{\sigma}$ - отношение полуширин линий в восстановленном и экспериментальном спектрах.

Если экспериментальная линия (15) получена с погрешностью измерения δ , то в соответствии с принципом невязки (10)-(11) должно выполняться соотношение

$$[h \sum_i [u(x_i) - \tilde{u}(x_i)]^2]^{1/2} = \delta. \quad (17)$$

После подстановки в (17) выражений (15) и (16) и замены сумм интегралами получается следующее соотношение для определения ε :

$$\delta = \frac{I}{\pi^{1/4}(2\sigma)^{1/2}} \left\{ 1 + (1+\varepsilon^2)^{-1/2} - 2\sqrt{2} (2+\varepsilon^2)^{-1/2} \right\}^{1/2}.$$

При малой относительной погрешности измерений ($\delta/I \ll 1$) из этого соотношения следует

$$\xi^2 \approx 4\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\delta}{I} \sqrt{\sigma}. \quad (18)$$

Если погрешность измерения $\delta/I \sim 1\%$ и аппаратурное уширение $\sigma \sim 3$, то соотношение (18) дает следующую оценку для улучшения разрешения: $\xi \approx 1/3$. Таким образом, можно утверждать, что в практически интересных случаях применение метода регуляризации позволяет в несколько раз улучшать разрешение в обрабатываемом линейчатом спектре.

4. ВЫБОР СЕТОК И ТОЧНОСТЬ ВОССТАНОВЛЕНИЯ

Метод регуляризации позволяет получать более точное решение задачи (1), если в алгоритм восстановления включены данные о характере восстанавливаемого спектра. Выражение (18) дает априорную оценку для полуширины линии в восстановленном спектре и ею можно воспользоваться для задания сетки (7), на которой получается регуляризованное решение. Граничные точки (c, d) желательно задавать таким образом, чтобы они определяли интервал, на котором восстановленный спектр отличен от нуля. Если интервал восстановления выбрать более широким, то в решении появляются осцилляции, которые приводят к нежелательным эффектам при последующей интерпретации спектра (рис.1,а). Пусть после вычитания фона экспериментальный спектр определен на отрезке (a, b) и аппаратная функция описывается распределением (12), тогда концы интервала восстановления можно задать, например, следующим образом:

$$c = a + 2(\sigma - \sigma_1); \quad d = b - 2(\sigma - \sigma_1). \quad (19)$$

Если интервал восстановления (c, d) меньше интервала (a, b), то соответствующим образом можно уменьшить шаг h_1 , что приведет к повышению точности восстановления.

Погрешность восстановления обычно определяется как среднеквадратичное отклонение регуляризованного решения \bar{x}_α от точного, "истинного" решения x_T . Будем считать, что из-за статистического характера погрешностей измерения спектра $u(x)$ восстановленный спектр \bar{x}_α представляет собой набор величин, определенных со случайными отклонениями, поэтому погрешность восстановления определяется усредненным выражением

$$\Delta_\alpha = \left[\sum_{i=1}^m h_i (\bar{x}_\alpha - x_T)_i^2 \right]^{1/2} = \left[\sum_{i=1}^m \mathcal{D}_{ii}(\bar{x}_\alpha) h_i + \sum_i (\bar{x}_\alpha - x_T)_i^2 h_i \right]^{1/2}, \quad (20)$$

здесь черта означает статистическое усреднение;

$\mathcal{D}_{ii}(\bar{x}_\alpha)$ — дисперсия случайной величины $(\bar{x}_\alpha)_i$, являющаяся диагональным элементом матрицы ошибок $\mathcal{D}(\bar{x}_\alpha)$;

$(\bar{x}_\alpha)_i$ — математическое ожидание величины $(\bar{x}_\alpha)_i$.

Из соотношения (9) согласно теории переноса ошибок [3]

$$(\bar{x}_\alpha)_i = (A_\alpha^{-1} \tilde{A} \bar{u})_i : \\ \mathcal{D}(\bar{x}_\alpha) = A_\alpha^{-1} \tilde{A} \mathcal{D}(u) (A_\alpha^{-1} \tilde{A})^*$$

где знак * означает транспонирование матрицы,

\bar{u} , $\mathcal{D}(u)$ — математическое ожидание и матрица ошибок вектора u .

Полагая, что

$$\bar{u} = A x_T \quad (21)$$

и координаты вектора u статистически независимы, т.е.

$$\mathcal{D}_{ij}(u) = \delta_{ij} \cdot \Delta u_i^2,$$

получаем окончательно

$$\Delta_{\alpha} = \left[\sum_j h_1 (A_{\alpha}^{-1} \tilde{A})_{ij}^2 \Delta u_j^2 + \sum_i h_1 (A_{\alpha}^{-1} \tilde{A} A \tilde{x}_T - \tilde{x}_T)_i^2 \right]^{1/2}. \quad (22)$$

Первое слагаемое $\Delta 1$ в выражении (22) обусловлено погрешностями измерения спектра, оно содержит известные величины и может быть вычислено в процессе решения задачи восстановления. Второе слагаемое $\Delta 2$ связано с тем, что метод регуляризации сводит решение задачи (1) к решению приближенного уравнения (3). Поскольку функция \tilde{x}_T не известна, то $\Delta 2$ можно вычислить приближенно, если вместо \tilde{x}_T подставить регуляризованное решение $\tilde{x}_{\alpha n}$.

5. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВОССТАНОВЛЕНИЕ СПЕКТРОВ

В соответствии с вышеизложенным алгоритм решения задачи восстановления на ЭВМ строится следующим образом:

- . задаются экспериментальный спектр, параметры фона и аппаратная функция;
- . на заданных сетках строятся матрицы A, \tilde{A}, Q и после вычитания фона вектор правой части u ;
- . задается закон построения убывающей последовательности значений α ;
- . для каждого значения α строится матрица A_{α} и решается уравнение (7);
- . для полученного решения \tilde{x}_{α} строится невязка $\rho(\alpha)$;
- . выбор решения прекращается, как только выполняется условие $\rho(\alpha) \leq \delta$;

. для выбранного решения по формуле (22) вычисляется погрешность восстановления.

Указанный алгоритм был заложен в программу вычислений для БЭСМ-6, написанную на языке АЛЬФА-6. Проверка алгоритма восстановления проводилась на спектрах, полученных методом машинного моделирования. Строились участки экспериментального спектра, содержащие неразрешенные линии. Точный спектр \mathcal{X}_T задавался набором δ -функций, определявшим положения $\{p\}$ и интенсивности $\{I\}$ линий. Аппаратная функция задавалась гауссовым распределением (12) или асимметричной, нормированной на единицу функцией

$$K(x, s) = \frac{2}{\sigma(1-\beta^2)} \frac{\sin \pi \beta}{\pi \beta} \left[e^{-\frac{(x-s)}{\sigma(1-\beta)}} + e^{-\frac{(x-s)^2}{\sigma(1+\beta)}} \right]^{-2}, \quad (23)$$

которая достаточно хорошо описывает форму фотопиков в гамма-спектрах; параметры σ и β определяют полуширину и асимметрию линии ($0 < \beta < 1$). Заданный точный спектр трансформировался аппаратной функцией в "экспериментальный". Погрешности измерения задавались в каждой точке спектра с помощью генератора случайных чисел в соответствии с величиной заданной относительной погрешности δ/I (где I - суммарная интенсивность линий). Параметры моделируемых спектров варьировались в следующих пределах: интенсивности линий $1000 \div 6000$ (в относительных единицах), расстояния между линиями $\sigma - 2\sigma$, относительная погрешность измерения $0,5 - 5\%$. Для каждого набора параметров строилась серия из пяти спектров, отличившихся только случайным распределением погрешностей. Полученные таким образом спектры восстанавливались методом регуляризации. Функции

$$q_0(s) \text{ и } q_1(s) \text{ задавались в виде } q_1(s) \equiv 0, \\ q_0(s) = 1 + \beta \left(s - \frac{\pi}{2} h_1 \right)^2, \text{ где } 0 \leq \beta \leq 0.1.$$

Несколько примеров моделируемых участков спектра и результаты их восстановления представлены на рис.1 и в табл.1,2.

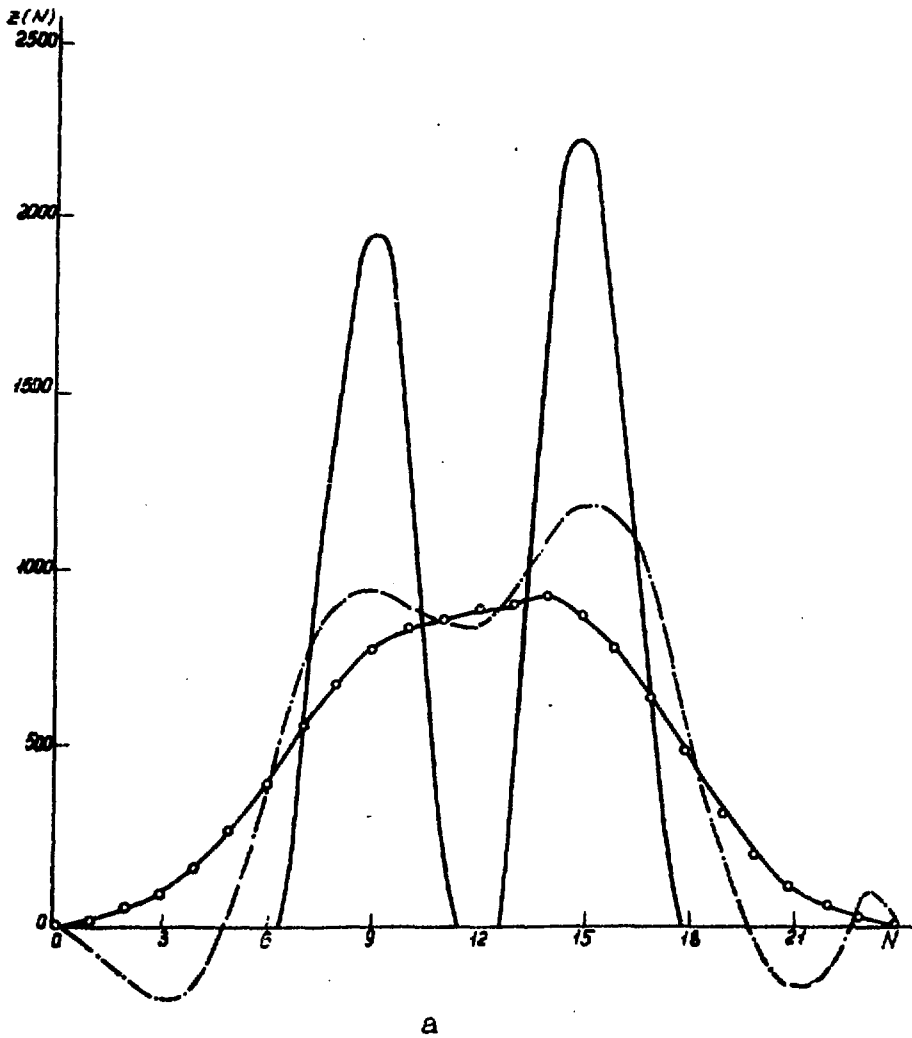
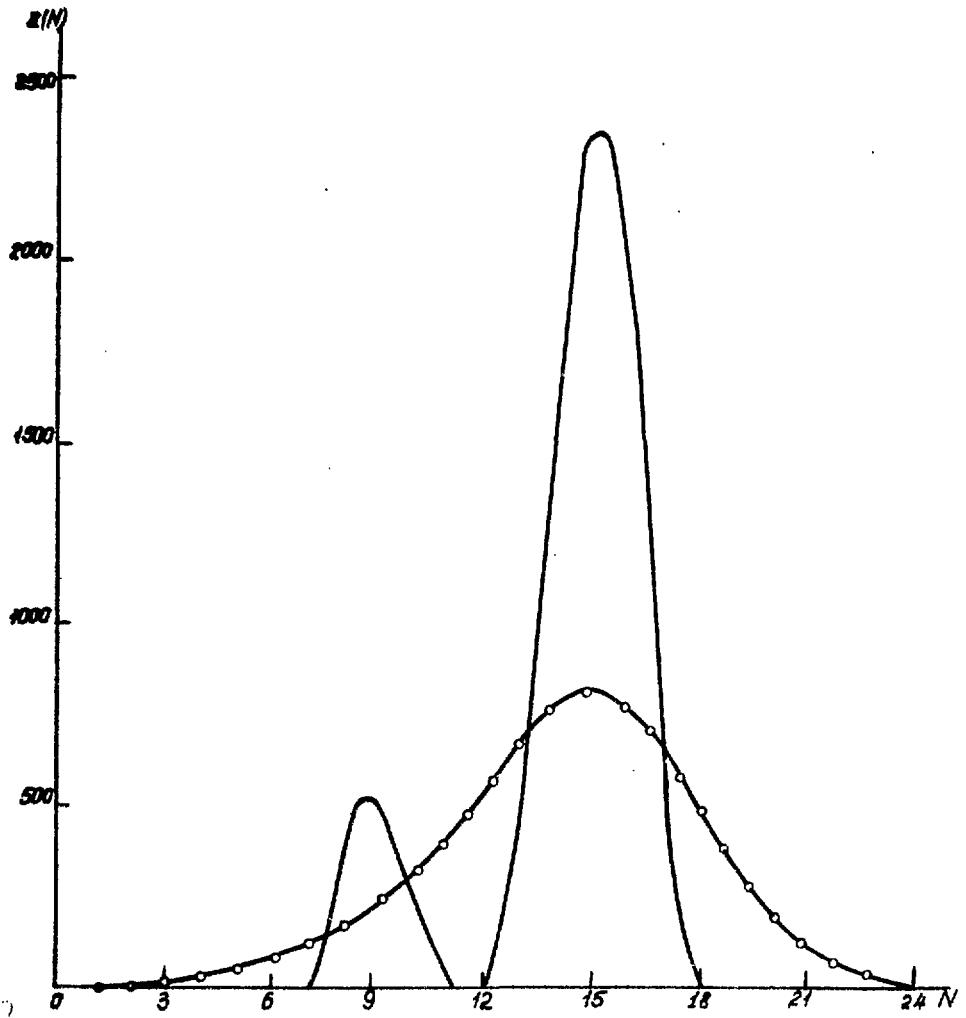
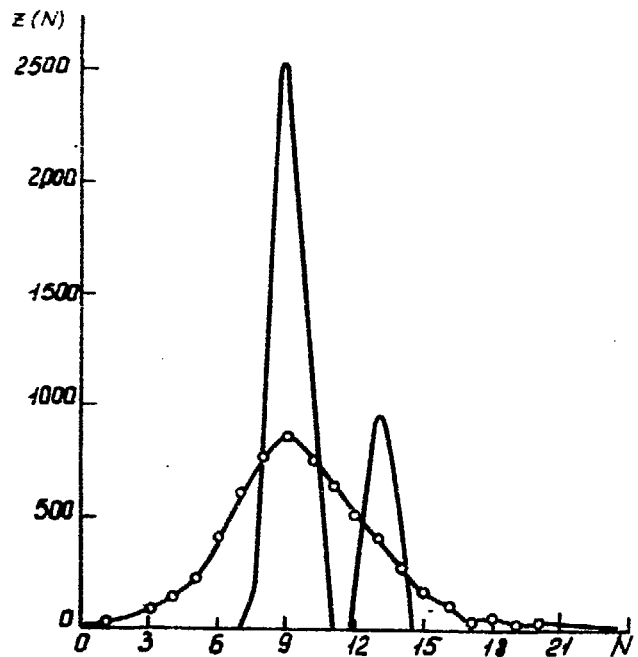


Рис.1. Результаты моделирования и восстановления спектров с аппаратной функцией, описываемой гауссовым (а, б) ($\sigma = 3$) и асимметричным (в, г) распределениями ($\sigma = 3$, $\beta = 0,1$): \circ — "экспериментальный" спектр; — — — — — восстановленный спектр; - - - - - спектр, восстановленный при неудачном выборе интервала восстановления.

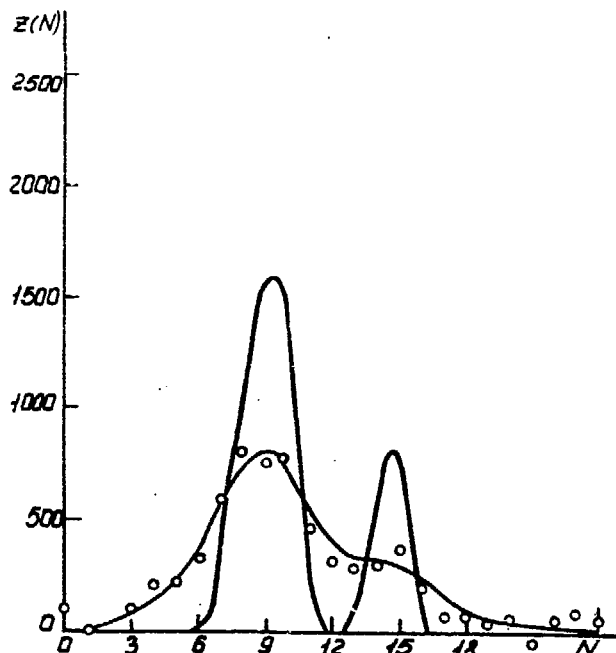


6

Рис.1. Продолжение



В



Г

Рис.1. Окончание

Таблица 1

Сравнение параметров моделируемых и восстановленных спектров

Но- мер ри- сун- ка	Моделируемый спектр				Восстановленный спектр			
	ρ_1	ρ_2	I_1	I_2	ρ_1	ρ_2	I_1	I_2
1,а	9	15	5000	6000	9,05	14,9	5200	6144
1,б	9	15	1000	6000	8,6	14,7	1070	6100
1,в	9	13	4650	1550	9,1	13,4	4520	1380
1,г	9	15	4650	1550	9,05	14,77	4350	1320

Таблица 2

Погрешности восстановления моделируемых спектров

Но- мер ри- сун- ка	$\Delta_{\text{экс}}$	Δ_{α_n}	$\Delta_{\alpha_n}/I, \%$	$\delta/I, \%$	δ	δ_1
1,а	625	930	8,5	0,5	50	3,5
1,б	600	610	8,8	0,6	40	3,4
1,в	590	717	11,5	1,3	90	8
1,г	933	921	14,9	4,2	270	41

Результаты обработки модельных спектров (табл.1) были использованы для проверки вычисляемой по формуле (22) погрешности восстановления. Для этого определялись отклонения положений и интенсивностей линий восстановленного спектра от заданных значений, а также отклонения полуширин линий восстановленного спектра от полуширины, определяемой оценкой (18). В каждой серии из пяти спектров, отличающихся случайным распределением погрешностей, эти отклонения усреднялись и затем рассматривались как дисперсии указанных величин. Если форма линий восстановленного спектра описывается распределением (14), то можно показать, что среднеквадратичное отклонение по спектру, соответствующее погрешности восстановления Δ_α (22), выражается через дисперсии интенсивностей $\mathcal{D}(I_\nu)$, положений $\mathcal{D}(\rho_\nu)$ и полуширин $\mathcal{D}(\sigma_\nu)$ линий следующим образом:

$$\Delta_{\text{эксп}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{\nu=1}^M \frac{I_\nu^2}{\sigma_\nu} \left[\frac{\mathcal{D}(I_\nu)}{I_\nu^2} + \frac{1}{4} \frac{\mathcal{D}(\rho_\nu)}{\sigma_\nu^2} + \frac{3}{4} \frac{\mathcal{D}(\sigma_\nu)}{\sigma_\nu^2} \right], \quad (24)$$

где M - число линий в спектре.

При подстановке в (24) "экспериментально" полученных дисперсий были вычислены величины $\Delta_{\text{эксп}}$, которые оказались сравнимыми с погрешностями Δ_α (табл.2).

Для всех рассмотренных типов спектров результаты вычисления погрешностей восстановления (табл.2) сводятся к следующему:

. относительная погрешность восстановления $\Delta_{\alpha M}/I$ определяется не только погрешностью измерения δ/I , но зависит также от характера спектра и вида аппаратной функции;

. вклады слагаемых Δ_1 и Δ_2 в погрешность восстановления Δ_α при $\alpha = \alpha_M$ сравнимы по величине;

. погрешность $\Delta 1$ зависит от параметра регуляризации

$$\Delta 1(\alpha) = \delta 1 / \sqrt{\alpha}, \quad (25)$$

где $\delta 1$ - число, определяемое характером спектра, причем всегда $\delta 1 \leq \delta$; вид $\Delta 1(\alpha)$ соответствует зависимости, полученной для погрешности решения линейных некорректных задач [4], частным случаем которых является интегральное уравнение Фреугольма 1-го рода с ядром вида (14) или (23).

Результаты обработки модельных спектров методом регуляризации показали, что оценкой полуширины линии (18) и выбором параметра регуляризации по невязке (10) можно пользоваться, если выполняются условия $\sigma \geq 3h$ и $\delta/I \geq 0,5\%$. В случае большей точности измерений или при большей ширине канала h нужно учитывать погрешность конечно-разностной аппроксимации (6), (7), что приводит к более сложным выражениям для невязки [5], и для оценки полуширины линии.

6. ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ СПЕКТРОВ

Цель математической обработки δ -спектров активационного анализа состоит в определении положений и площадей фотопиков, по которым впоследствии устанавливается содержание изотопов в исследуемых образцах. Идентификация спектров затруднена, если они содержат неразрешенные пики-мультиплеты (рис.2). Метод наименьших квадратов, применяемый обычно для разрешения мультиплета на отдельные составляющие, обладает одним существенным недостатком: он дает однозначное решение, если известны приблизительно положения составляющих линий и порядок мультиплетности. В ряде случаев эти характеристики не известны, например, трудно заранее установить порядок мультиплетности фотопика 1 (рис.2). Применение метода наименьших квадратов для разделения его на две

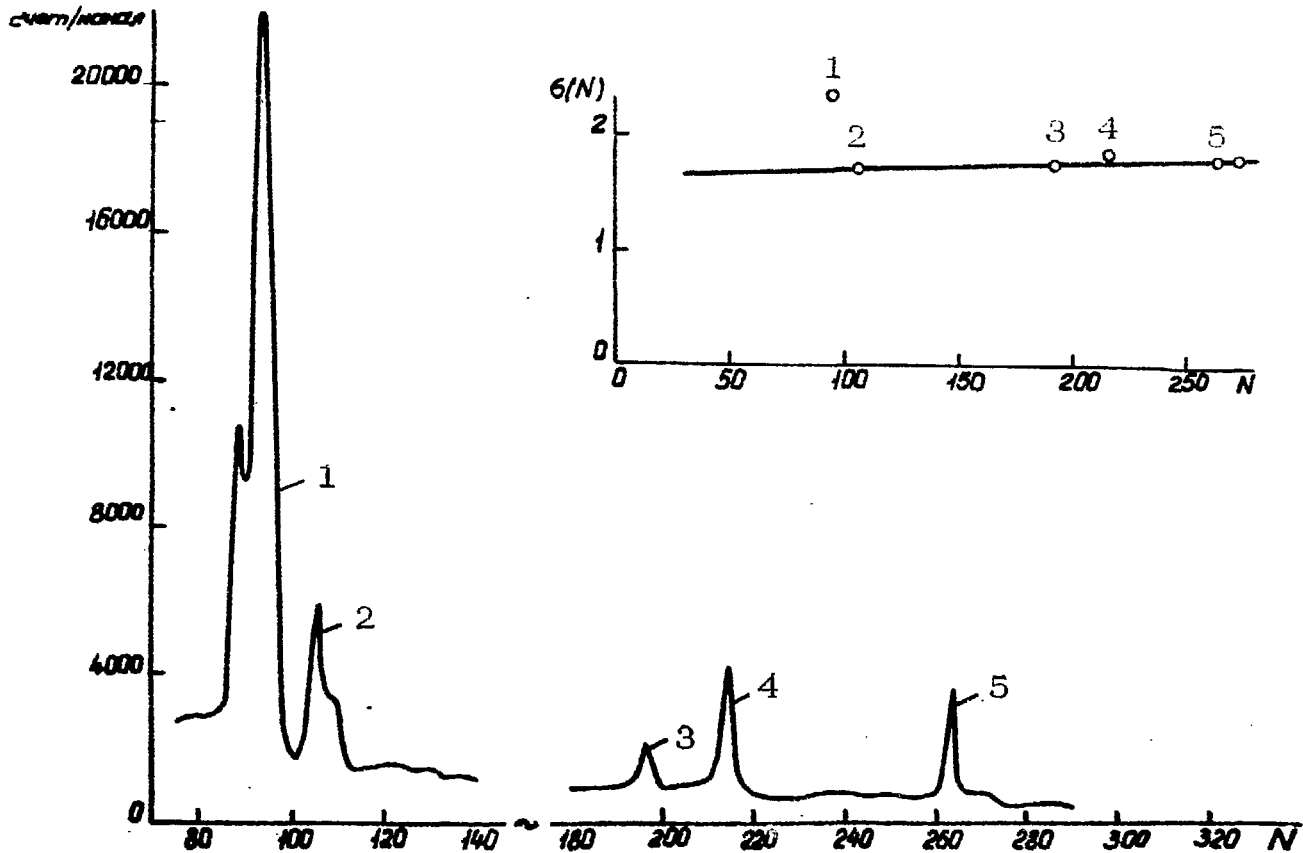


Рис.2. Участок гамма-спектра, содержащий одиночные пики 3, 4, 5, дублет 2 и подозрительный мультиплет 1. Аппаратная функция на участке определена зависимостью $G(N)$. (справа, вверху) и $\beta = 0,05$

составляющие не приводит к положительным результатам, так как при этом оказывается, что ширина составляющих линий не соответствует общей зависимости ширины от номера канала (рис.2). В подобных ситуациях полезным оказывается применение метода восстановления, который позволяет установить тонкую структуру мультиплетта, если известна аппаратная функция. В гамма-спектрах она целиком определяет форму одиночных фотопиков, поэтому данные первичной обработки спектра (выделение одиночных пиков и определение их формы) были использованы для построения зависимости параметров σ и β от номера канала (рис.2) и для задания аппаратной функции (23) на всем участке спектра.

Результат восстановления отдельных участков спектра (рис.3) свидетельствует о триплетном характере фотопика 1 и подтверждает правильность предполагаемого порядка мультиплетности остальных пиков. Сравнение параметров триплетта в восстановленном спектре с параметрами, полученными при расшифровке экспериментального триплетта методом наименьших квадратов (табл.3), показывает, что оба метода дают близкие результаты и сравнимую точность.

Результаты обработки сложных участков гамма-спектров методом восстановления показали целесообразность включения его в общую программу обработки спектра для расшифровки мультиплеттов. При этом может быть принята следующая последовательность обработки:

- . определение аппаратной функции по форме одиночных фотопиков;
- . выявление методом восстановления тонкой структуры участков спектра, подозрительных на мультиплетность;
- . окончательная обработка спектра с целью определения положений и площадей отдельных линий.

Рентгеноструктурный анализ кристаллов, подвергаемых механическому воздействию и облучению, ставит за-

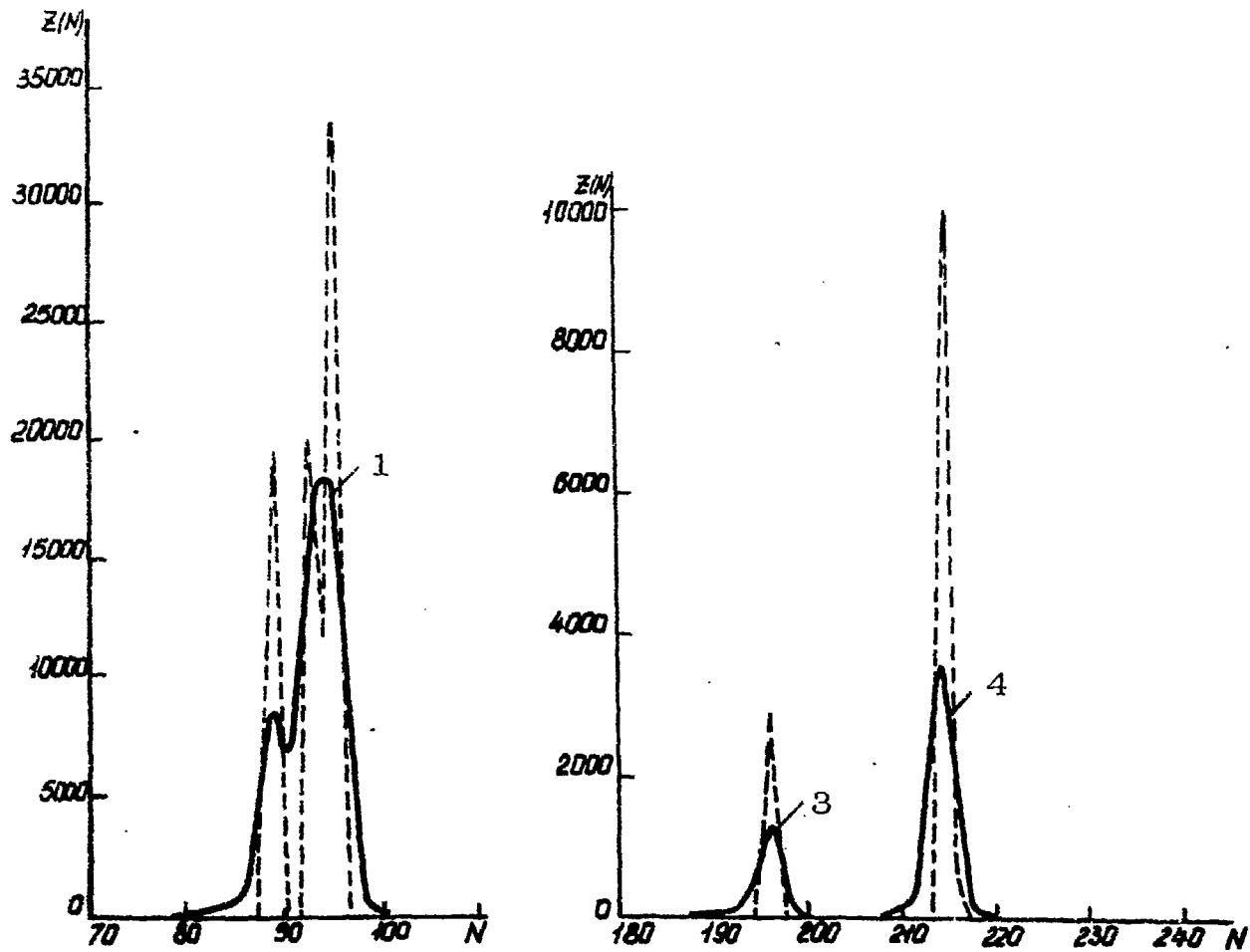
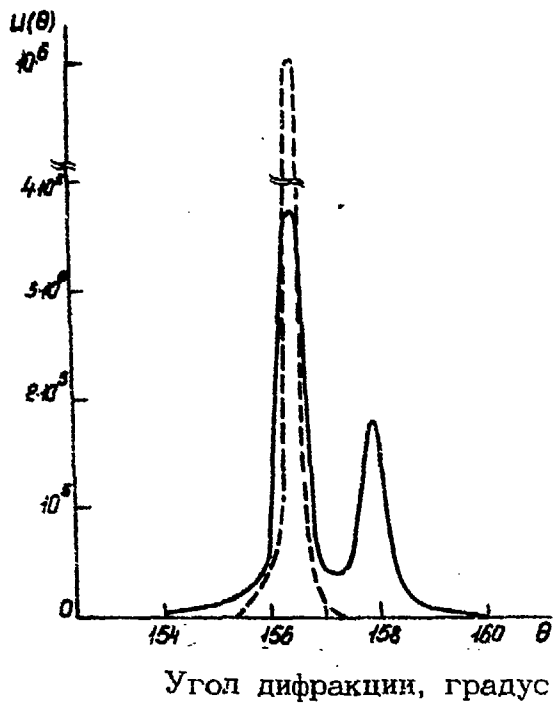


Рис.3. Участки гамма-спектра после вычитания фона (—) и восстановленный спектр (---); 1,3,4 - то же, что и на рис.2

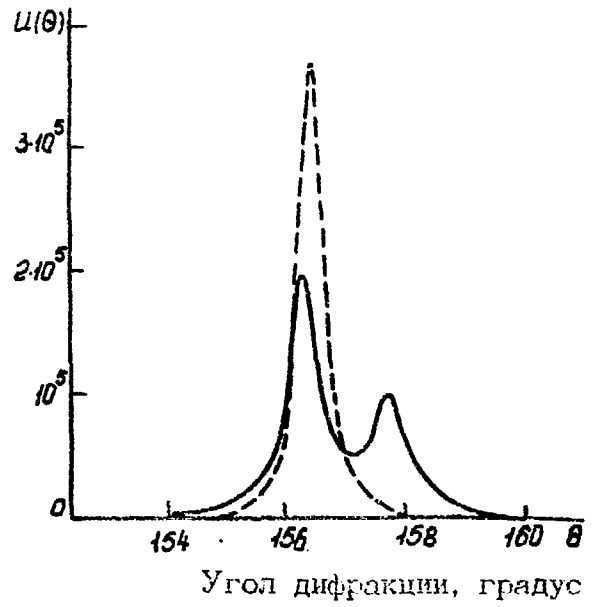
Параметры гришета, полученные в восстановленном спектре и методом наименьших квадратов

Параметр		Метод восстановления	Метод наименьших квадратов
Положение пиков (по- мор координат)	ρ_1	$88,85 \pm 0,05$	$88,78 \pm 0,05$
	ρ_2	$92,76 \pm 0,06$	$92,79 \pm 0,07$
	ρ_3	$95,17 \pm 0,04$	$95,06 \pm 0,05$
Площадь под пиками	S_1	34400 ± 3000	27245 ± 871
	S_2	34800 ± 4050	37818 ± 1565
	S_3	60500 ± 4200	53624 ± 1928

дачу определения сдвига и уширения структурных пиков и выявления плавного распределения диффузного рассеяния [6]. Изучение указанных рентгеноструктурных эффектов затруднено из-за аппаратного уширения линий. Задача исключения аппаратного уширения может быть решена методом восстановления. Изложенный выше алгоритм был применен для обработки рентгенограмм, полученных на облученном молибдене (рис.4). Аппаратная функция определялась по форме линий образца-эталоны и задавалась таблично, поскольку её трудно описать единым аналитическим выражением из-за "крыльев" линий. Характер линий восстановленного спектра (рис.4) позволяет судить о том, что радиационные эффекты в молибдене приводят к сдвигу структурных пиков, их уширению и появлению составляющей диффузного рассеяния в районе структурного пика. Выделение в полученных спектрах структурных пиков и составляющей

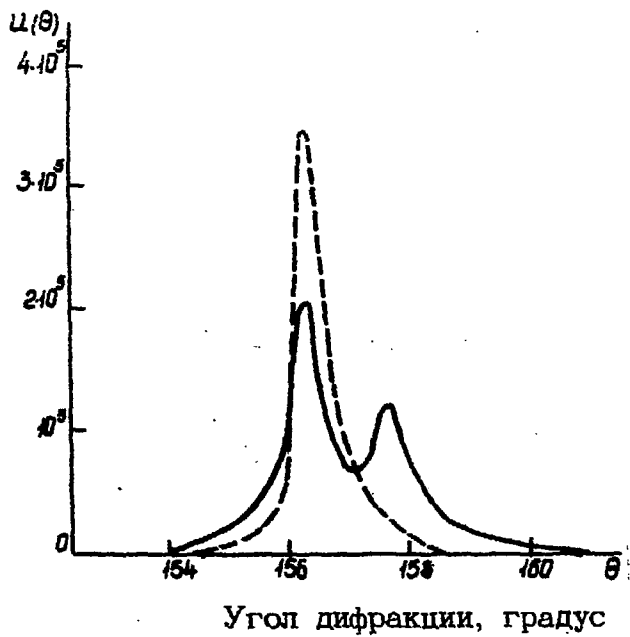


а

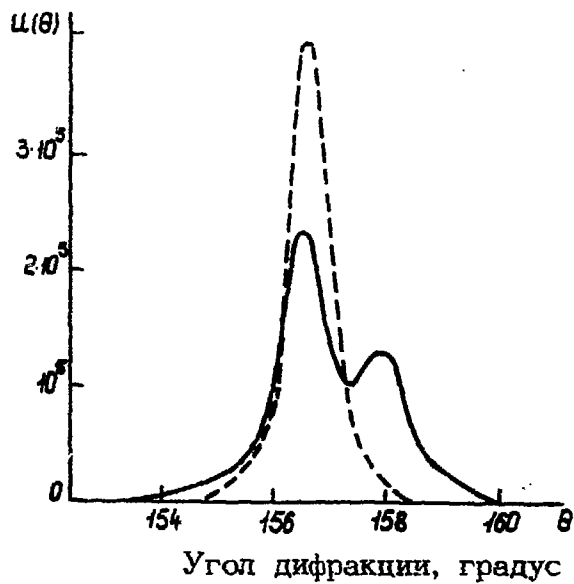


б

Рис.4. Угловые распределения рефлекса $\{400\}$ ($Cu K_{\alpha}$ -излучение), полученные на молибдене: а - необлученный образец; б, в, г - облученный факетами $1,5 \cdot 10^{20}$; $3,3 \cdot 10^{20}$; $2,1 \cdot 10^{21}$ нейтр./см² соответственно; — — — — экспериментальный спектр; - - - - восстановленный спектр



В



Г

Рис.4. Окончание

диффузного рассеяния представляет собой самостоятельную задачу, решение которой даст количественную информацию о структуре облученного кристалла.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При обработке линейчатых спектров наряду с задачей восстановления возникает задача улучшения разрешения, которая может быть решена методом регуляризации. В работе показано, что соображения о характере гладкости регуляризованного решения позволяют получить оценку улучшения разрешения, использование которой в алгоритме восстановления приводит к повышению точности получаемых результатов.

Приводимый в работе алгоритм расчета погрешности восстановления проверялся на результатах обработки модельных спектров. В результате проверки показано, что отклонение параметров восстановленного спектра от заданного, моделируемого, лежит в пределах вычисляемой погрешности. Обосновывается целесообразность применения метода регуляризаций для расшифровки сложных участков гамма-спектров активационного анализа, при этом показано, что он дает точность, сравнимую с точностью метода наименьших квадратов, но обладает тем преимуществом, что не требует априорных данных о характере восстанавливаемого спектра.

Приводятся результаты применения метода регуляризации для восстановления истинной формы рентгеновских линий, анализ которой дает информацию о структурных изменениях облученных кристаллов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М., "Наука", 1974.
2. Морозов В.А. О принципе невязки при решении оператор-

ных уравнений методом регуляризации. Журнал вычислительной математики и математической физики, 1968, т. 8, № 2, с.295.

3. Худсон Д. Статистика для физиков. М., "Мир", 1967.
4. Лаврентьев М.М. О некоторых некорректных задачах математической физики. Новосибирск, 1962.
5. Гончарский А.В. и др. Конечно-разностная аппроксимация линейных некорректных задач. Журнал вычислительной математики и математической физики, 1974, т.14, № 3, с.15.
6. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М., "Наука", 1967.

Рукопись поступила в ОПИНТИ
24.03.78, обработана 27.09.78.
Окончательно подготовлена
авторами 29.09.78.

Редактор М.К.Карацуба

Корректор Л.Н.Кривошеева

Пошито к печати 21.11.78. Т-19858. Формат 60x90 1/16.
Офсетная печать. Ус.-печ.л. ~1,8. Уч.-изд.л. ~1,5.
Тираж 170 экз. Индекс 3624. Заказ 1810. Цена 15 коп.

Отпечатано на ротапринте НИИАРа, декабрь 1978 г.
433510, Дамитровград-10, НИИАР

Применение метода регуляризации для целей активационного и рентгеноструктурного анализа

Изучается возможность применения метода регуляризации для обработки линейчатых спектров с целью улучшения разрешения. Приводятся результаты применения метода для расшифровки сложных участков гамма-спектров активационного анализа. Предлагается использовать метод регуляризации для восстановления "истинной" формы рентгеновских линий по данным рентгеноструктурного анализа.

Препринт Научно-исследовательского института атомных реакторов
им. В.И.Ленина, Димитровград, 1978 г.

R.B. Grabova

RIAR P-23 (357)

UDC 518.62

The Use of the Regularization Method in the Activation and X-Ray Diffraction Analysis

The study has been performed on the possibility of the regularization method application to the line spectra treatment for improving the resolution. Presented are the results obtained while using the method in decoding the complicated regions of γ - spectra in the activation analysis. It is suggested to use the regularization method for restoration of the "true" form X-ray curves according to the results from the X-ray diffraction analysis.

Preprint. Research Institute of Atomic Reactors named after
V.I. Lenin, Dimitrovgrad, 1978

Цена 15 коп.

Индекс 3624