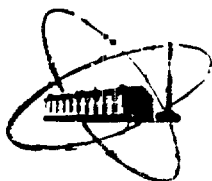


ФЭИ-1632



ФИЗИКО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

В. П. СЕМЕНОВ, Л. А. ТРАКОВ

Разрешение спектрометрических систем различных типов. Постановка проблемы

Обнинск — 1984

УДК 539.1.074.8

В. П. Семенов, Л. А. Трыков.

Разрешение спектрометрических систем различного типа. Постановка проблемы

ФЭИ-1632. Обнинск: ФЭИ, 1984. — 24 с.

В работе приведены результаты теоретического исследования проблемы разрешения спектрометрических систем различного типа. Введены понятия спектрометрической системы и ее информационного канала. Рассмотрен вопрос об основных типах спектрометрических систем. Сформулирован нетрадиционный подход к проблеме разрешения. Дана общая математическая формулировка задачи разрешения.



В В Е Д Е Н И Е

Относительно недавно, в 60-х годах, начали использовать для оценки энергетических спектров нейтронов новые методы, такие как метод шаровых замедлителей [1-3], метод активационных детекторов (пороговых и резонансных индикаторов) [4], метод фильтров [5]. Благодаря быстрому развитию способов решения некорректных задач, появлению соответствующих программных средств обработки данных, эта группа методов приобрела статус спектрометрических. В настоящее время первые два метода используются в интегральных экспериментах, в том числе в базовых экспериментах физики защиты.

Рассматриваемые методы принципиально отличаются от традиционных, поэтому их можно выделить в особый тип методов - неклассические методы спектрометрии. Это отличие связано, прежде всего, с тем, что регистрация частиц происходит с помощью набора интегральных детекторов, функция отклика имеет другую форму и иначе интерпретируется, нежели в традиционных - классических методах. Вопрос о типах спектрометрических методов рассмотрен в разделе 4.

Идеи, положенные в основу указанных методов спектрометрии нейтронов, могут быть использованы для построения аналогичных методов спектрометрии гамма-излучения и других типов ионизирующих излучений. Поэтому в настоящей работе будут рассмотрены спектрометры ионизирующих излучений и спектрометрические методы независимо от типа измеряемого излучения.

Вопрос об энергетическом разрешении всегда был и остается одним из самых важных, так как величина разрешения дает в простой и наглядной форме оценку информационных возможностей спектрометра.

Однако эта проблема не исследована для неклассических методов спектрометрии. Нет определенного ответа на вопросы: что есть разрешение спектрометра неклассического типа, в каком смысле его понимать, как оно связано с информационными свойствами спектрометров, каким образом можно его оценить?

В предлагаемой вниманию работе сделана попытка ответить на эти вопросы.

1. РАЗРЕШЕНИЕ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Под спектрометрической системой будем понимать систему, состоящую из двух основных компонентов: собственно спектрометра, т.е. прибора, включающего в себя детекторы и вторичную электронную аппаратуру, и комплекса средств обработки данных.

В процессе измерения на выходе спектрометра регистрируется аппаратный спектр $u(V)$, который связан с энергетическим спектром $\varphi(E)$ уравнением Фредгольма I-го рода

$$u(V) = \int_{E_B}^{\infty} K(E, V) \varphi(E) dE, \quad (I)$$

где E_B - энергетический порог спектрометрической системы. Ядро $K(E, V)$ уравнения (I) представляет собой функцию отклика спектрометра, нормированную на чувствительность. $K(E, V)$ характеризует плотность распределения сигналов V на выходе спектрометра при единичной плотности потока излучения с энергией E . При регистрации моноэнергетического излучения

$$\varphi(E) = \delta(E - E_0),$$

где $\delta(E - E_0)$ - дельта-функция Дирака, аппаратный спектр совпадает с функцией отклика для $E = E_0$, т.е.

$$u(V) = \int_{E_B}^{\infty} K(E, V) \delta(E - E_0) dE = K(E_0, V).$$

Функция отклика спектрометра традиционного, классического типа имеет колоколообразную форму близкую к треугольной, трапецевидной или прямоугольной. Чаще всего функцию отклика аппроксимируют функцией плотности нормального распределения. Такую функцию отклика можно описать формулой

$$K(E, V) = S(E) \cdot P(E, V), \quad (2)$$

где $S(E) = \int_{V_B}^{\infty} K(E, V) dV$ - чувствительность детектора, а $P(E, V)$ передает форму единичного по площади колокола, т.е.

$$\int_{V_B}^{\infty} P(E, V) dV = 1,$$

V_B - уровень чувствительности регистрирующего устройства.

Вторым основным компонентом спектрометрической системы являются средства обработки данных, которые позволяют по измеренному аппаратному спектру восстановить энергетический спектр, оценить его погрешность, получить другие интересующие исследователя параметры. Средства обработки данных представляют собой совокупность методов, алгоритмов, вычислительных программ и ЭВМ, с помощью

которых ведется обработка.

Если известна функция связи энергетической и аппаратурной шкал $V = f(E)$, то аппаратурное распределение нетрудно преобразовать в энергетическое по формуле

$$\varphi(E) = \frac{1}{S(E)} \cdot \frac{df(E)}{dE} \cdot u[f(E)]. \quad (3)$$

В классической спектрометрии проблема получения (восстановления) искомого спектра сводится к преобразованию шкал и учету чувствительности по формуле (3). При этом неявно предполагается, что уравнение (1) с точными значениями спектра $\varphi(E)$ можно заменить уравнением со средними значениями $\bar{\varphi}(E)$ на интервале $[E-\Delta E, E+\Delta E]$ где функция отклика значимо отлична от нуля

$$\int_{E_0}^{\infty} K(E, V) \varphi(E) dE = \left\{ \int_{E-\Delta E}^{E+\Delta E} K(E, V) dE \right\} \cdot \bar{\varphi}(E) = S(E) \cdot \bar{\varphi}(E) \left[\frac{df(E)}{dE} \right]^{-1} \quad (4)$$

Таким образом, формула (3) дает энергетический спектр, усредненный по функции отклика. Этот спектр отличается от истинного на величину искажения, вносимого функцией отклика $K(E, V)$. Чем ближе $K(E, V)$ к δ -функции, т.е. чем уже "колокол", тем меньше искажение. Искажение выражается в потере части информации о спектре: мелкие детали стираются, спектр как бы "заплывает". Степень "заплывания" спектра принято характеризовать величиной разрешения спектрометра. Разделяют аппаратурное и энергетическое разрешение.

Аппаратурным разрешением спектрометра называют отношение ширины функции отклика $K(E, V)$ (или $P(E, V)$) на половине её высоты к значению $V(E)$ в точке E , т.е. $\Delta V/V$.

Энергетическое разрешение $\eta(E)$ спектрометра обычно определяют как отношение ширины ΔE функции отклика $K(E, V)$ на её половине к E , $\eta(E) = \Delta E/E$.

Для целей нашего исследования удобно дифференцировать понятие энергетического разрешения на два понятия: энергетического абсолютного разрешения и энергетического относительного разрешения. Назовем энергетическим абсолютным разрешением $\Delta(E)$ ширину ΔE функции отклика $K(E, V)$ на её половине. Тогда относительным энергетическим разрешением $\eta(E)$ будет являться отношение $\eta(E) = \Delta E/E$. Т.е. энергетическое относительное разрешение в нашем понимании эквива-

лентно энергетическому разрешению в традиционной терминологии. $\Delta(E)$ и $\eta(E)$ являются локальными (в точке E) абсолютным и относительным энергетическими разрешениями. Можно также говорить об их средних значениях Δ и η на участке энергетической шкалы.

Функция отклика $K(E, \nu)$ характеризует приборную часть спектрометрической системы. Используя формулу (3), напишем выражение для функции отклика спектрометрической системы в целом

$$P(E, E') = \frac{1}{S(E)} \cdot \frac{d\nu}{dE'} \cdot K(E, \nu) = \frac{df(E')}{dE'} \cdot P[E, f(E')] \quad (5)$$

Из этой формулы видно, что $P(E, E') = c \cdot P(E, \nu)$, где $c = df(E')/dE'$ - постоянный коэффициент при фиксированном E' . Поэтому энергетическое разрешение, вычисленное по функциям отклика $P(E, \nu)$ и $P(E, E')$ одинаково. Следовательно, энергетическое разрешение зависит только от первого компонента спектрометрической системы, т.е. собственно спектрометра. Благодаря этому, в классической спектрометрии понятия "разрешение спектрометра" и "разрешение спектрометрической системы" совпадают.

При использовании неклассических методов спектрометрии второй компонент спектрометрической системы - комплекс средств обработки данных - оказывает большое влияние на форму функции отклика $P(E, E')$. Здесь имеет смысл говорить только об энергетическом разрешении спектрометрической системы в целом.

Энергетическое относительное разрешение спектрометрической системы можно определить как отношение ширины $\Delta E'$ функции отклика $P(E, E')$ на половине её высоты к E' при фиксированном E . Это определение эквивалентно предыдущему в том случае, если функция отклика есть функция разности аргументов, $P(E, E') = P(E - E')$, что характерно для спектрометров классического типа.

В дальнейшем под словом "разрешение" будем понимать энергетическое разрешение спектрометрической системы в целом.

Разрешение является одной из важнейших характеристик спектрометрической системы. Оно показывает в наглядной и естественной для экспериментатора форме, насколько велики потери информации при использовании конкретной спектрометрической системы. Величина разрешения в классических методах спектрометрии зависит только от физических свойств спектрометра и является естественным пределом возможностей данного метода. В конкретных измерениях разрешение ухудшается из-за статистических погрешностей.

2. РАЗРЕШЕНИЕ И ПОТЕРЯ ИНФОРМАЦИИ ПРИ ИЗМЕРЕНИИ СПЕКТРОВ

Функцию отклика $P(E, E')$, нормированную на единицу (см. формулу (2)), естественно интерпретировать как плотность вероятности наблюдения на выходе спектрометрической системы значения энергии E' при регистрации кванта излучения (частицы) с энергией E . Если спектрометрической системой регистрируется квант (частица) моноэнергетического излучения, то задачей измерения является определение его истинной энергии по наблюдаемому значению E' . Разрешение трактуется как естественная неопределенность, с которой можно оценить истинное значение E по наблюдаемому E' .

По аналогии с дисперсией погрешность оценки E по E' определим как среднее значение квадрата отклонения E от E'

$$\hat{D}(E) = \int_{E_a}^{\infty} (E - E')^2 P(E, E') dE. \quad (6)$$

$\hat{D}(E)$ связана с дисперсией $D(E)$ известным равенством

$$\hat{D}(E) = D(E) + (\bar{E} - E')^2. \quad (7)$$

В формуле (6) учитывается погрешность за счет смещения E' от среднего значения \bar{E} .

Погрешность сигнала V на выходе спектрометра равна

$$\hat{D}(V) \approx [df(E)/dE]^2 \cdot \hat{D}(E). \quad (8)$$

Погрешность спектра $\varphi(E)$ приближенно выражается формулой

$$D[\varphi] = \int_{E_a}^{\infty} [\varphi(E) - \varphi(E')]^2 P(E, E') dE \approx \left[\frac{d\varphi}{dE} \right]^2 \cdot \hat{D}(E). \quad (9)$$

Если смещение $(\bar{E} - E')$ учитывается при восстановлении спектров или равно нулю, то $\hat{D}(E) = D(E)$.

Информационные возможности спектрометрической системы прямо связаны с погрешностью оценки E по отклику E' . Согласно Фишеру [6] количество информации относительно какой-либо случайной величины обратно пропорционально её дисперсии, т.е. погрешности. Определим информационное качество спектрометрической системы как количество информации, которое она дает при измерении энергии кванта (частицы) излучения

$$q_n(E) = 1/D(E) = 1 / \int_{E-\Delta}^{\infty} (E-E')^2 P(E, E') dE. \quad (10)$$

Рассмотрим, как связано информационное качество $q_n(E)$ с абсолютным разрешением $\Delta(E)$ для различных форм функций отклика.

Функция отклика - плотность вероятности нормального распределения (см. рис. I а, б)

$$P(E, E') = [1/\sqrt{2\pi}\sigma] \cdot \exp\{- (E'-E)^2/2\sigma^2\}. \quad (11)$$

В этом случае

$$q_n(E) = 1/\sigma^2 = 8 \ln 2 / \Delta^2(E) = 5,54/\Delta^2(E). \quad (12)$$

Функция отклика - равнобедренный треугольник (см. рис. I а)

$$P(E, E') = \begin{cases} 0, & E' < E - \Delta(E), \\ \frac{1}{\Delta^2(E)} (E'-E) + \frac{1}{\Delta(E)}, & E - \Delta(E) \leq E' < E, \\ -\frac{1}{\Delta^2(E)} (E'-E) + \frac{1}{\Delta(E)}, & E \leq E' \leq E + \Delta(E), \\ 0, & E' > E + \Delta(E). \end{cases} \quad (13)$$

Тогда

$$q_{пт}(E) = 6/\Delta^2(E). \quad (14)$$

Функция отклика - прямоугольный треугольник (см. рис. I б)

$$P(E, E') = \begin{cases} 0, & E' < E - 2\Delta(E), \\ \frac{1}{2\Delta^2(E)} (E'-E) + \frac{1}{\Delta(E)}, & E - 2\Delta(E) \leq E' \leq E, \\ 0, & E' > E. \end{cases} \quad (15)$$

Формула (15) определяет "скошенный вправо" треугольник. "Скошенный влево" треугольник выражается формулой

$$P(E, E') = \begin{cases} 0, & E' < E, \\ -\frac{1}{2\Delta^2(E)} (E'-E) + \frac{1}{\Delta(E)}, & E \leq E' \leq E + 2\Delta(E), \\ 0, & E' > E + 2\Delta(E). \end{cases} \quad (16)$$

По формуле (10) получим

$$q_{пт}(E) = 1,5/\Delta^2(E). \quad (17)$$

Функция отклика - прямоугольник (см. рис. I а)

$$P(E, E') = \begin{cases} 0, & E' < E - \Delta(E)/2, \\ \frac{1}{\Delta(E)}, & E - \Delta(E)/2 \leq E' \leq E + \Delta(E)/2, \\ 0, & E' > E + \Delta(E)/2. \end{cases} \quad (18)$$

Получим

$$q_p(E) = 12/\Delta^2(E). \quad (19)$$

Функция отклика - прямоугольный треугольник с "изломом" гипотенузы (см. рис. I б). Параметры функции отклика: A - длина основания, a - длина малого основания, $0 \leq a \leq A$, h - высота точки излома гипотенузы, $0 \leq h \leq 1$, высота треугольника равна единице.

$$P(E, E') = \begin{cases} 0, & E' < E - A, \\ \frac{2h[(E' - E) + A]}{(A - a)(A - h + a)}, & E - A \leq E' \leq E - a, \\ \frac{2[(E' - E)(1 - h) + a]}{a(A - h + a)}, & E - a < E' < E, \\ 0, & E' > E. \end{cases} \quad (20)$$

Абсолютное разрешение равно

$$\Delta(E) = \begin{cases} \frac{a + (2h - 1)A}{2h}, & 1/2 < h \leq 1, \\ \frac{a}{2(1 - h)}, & 0 \leq h \leq 1/2. \end{cases} \quad (21)$$

Информационное качество равно

$$q_{ст}(E) = 6(A - a)(A - h + a) / \{h \cdot A^4 + a^3[A(1 - h) - a]\} \quad (22)$$

При $h = 1/2$ и $A = 3a$ получим

$$q_{ст}(E) = 0,73/\Delta^2(E). \quad (23)$$

Из формул (12), (14), (17), (19), (23) следует, что при одинаковом разрешении спектрометрические системы с различными функциями отклика обладают различным информационным качеством.

Наиболее распространенным типом функции отклика, которой аппроксимируют реальную функцию отклика, является плотность вероятности нормального распределения. Поэтому целесообразно сравнивать спектрометрические системы с различными по форме функциями отклика со спектрометрической системой, имеющей функцию отклика типа плотности вероятности нормального распределения.

Определим эквивалентное разрешение как разрешение спектрометрической системы с функцией отклика типа плотности вероятности нормального распределения (II), равной по информационному качеству

данной спектрометрической системе

$$\Delta_{\text{э}}(E) = 2\sqrt{2} \ell_n 2 \cdot \sqrt{D(E)} = 2,35/\sqrt{q(E)}. \quad (24)$$

Для рассмотренных выше типов функций отклика абсолютное эквивалентное разрешение равно

$$\Delta_{\text{э}} = \Delta_{\text{н}} = 0,96\Delta_{\text{рт}} = 1,92\Delta_{\text{пт}} = 0,68\Delta_{\text{п}} = 2,75\Delta_{\text{ст}}. \quad (25)$$

На рис. 1 а, б показаны рассмотренные типы функций отклика с одинаковым эквивалентным разрешением $\Delta_{\text{э}}$.

Отсюда видно, что при традиционном способе сравнения информационного качества спектрометрических систем по разрешению погрешность может быть весьма значительной. Вообще говоря, можно представить такую функцию отклика, что погрешность будет неограниченно большой. Например, если в формуле (20) положить $h = 0,5$, $A = \beta \cdot a$, то при $\beta \gg 1$

$$\Delta = a, \quad q = 6/\beta^2 \Delta^2.$$

При постоянном $\Delta = a$ и стремлении β к бесконечности информационное качество q стремится к нулю, соответственно эквивалентное разрешение $\Delta_{\text{э}} = 0,96\beta\Delta \rightarrow \infty$, т.е. погрешность $\xi = (\Delta_{\text{э}} - \Delta)$ возрастает неограниченно.

Этот пример и равенства (25) показывают, что принятое в традиционной спектрометрии сравнение спектрометров по разрешению является в ряде случаев неудовлетворительным. Принципиально более правильным, на наш взгляд, является сравнение по информационному качеству или, что фактически то же самое, по эквивалентному разрешению.

Для классических методов спектрометрии эквивалентное разрешение мало отличается от разрешения в традиционном смысле, так как функции отклика спектрометров близки по форме к функции плотности вероятности нормального распределения. В неклассических методах спектрометрии - противоположная ситуация. Функции отклика могут иметь (если их можно построить) сложную форму. Поэтому сравнивать спектрометрические системы следует по эквивалентному разрешению.

3. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ПОГРЕШНОСТЬ СПЕКТРОВ, ПОГРЕШНОСТЬ ЗА СЧЕТ РАЗРЕШЕНИЯ

Погрешность измеренного спектра складывается из двух основных компонентов: статистической погрешности и погрешности за счет конечного разрешения спектрометрической системы. Обозначим дисперсию спектра, обусловленную разрешением, D_p , дисперсию, обусловленную статистической погрешностью аппаратурного спектра, D_A . Полная дисперсия D_φ приближенно равна

$$D_\varphi = D_p + D_A \approx \left[\frac{d\varphi}{dE} \right]^2 \frac{\Delta^2}{8\ln 2} + \left[\frac{df(E)}{S(E)} \right]^2 D(V), \quad (26)$$

где $D(V)$ - дисперсия, обусловленная статистической погрешностью аппаратурного спектра в точке V . Погрешностями функций $f(E)$ $S(E)$ мы пренебрегаем.

Если $D(V)$ мала, т.е. $D_A \ll D_p$, погрешность спектра определяется только разрешением Δ спектрометрической системы и является минимальной для исследуемого типа спектра.

Спектр, который содержит заметные статистические погрешности, обычно сглаживают, либо на глаз, либо с помощью формализованных процедур. В том и другом случаях, используя априорную информацию или какие-то общие соображения, на спектр накладывают дополнительные ограничения. Сглаживание приводит к формальному уменьшению дисперсии D_A в формуле (26). Так как полная дисперсия D_φ спектра не должна уменьшаться (считаем, что сглаживание проводится достаточно корректно и не увеличивает D_φ), то дисперсия D_p должна возрасти.

Таким образом, реальное разрешение, с которым измерен конкретный спектр, всегда больше разрешения спектрометрической системы за счет статистических погрешностей аппаратурного спектра. В предельном случае, когда $D_p \ll D_A$ и $D_\varphi \approx D_A$, реальное эквивалентное разрешение можно определить по формуле

$$\frac{\Delta^2}{8\ln 2} \approx \left[\frac{d\varphi}{dE} \right]^{-2} \cdot D_A = \left[\frac{d\varphi}{dE} \right]^{-2} \left[\frac{df(E)}{S(E)} \right]^2 D(V). \quad (27)$$

При этом предполагается, что после сглаживания формально вычисляемая дисперсия аппаратурного спектра $D_A^{сг}$ $\ll D_A$. В противном случае формула (27) имеет вид

$$\frac{\Delta^2}{8\ln 2} \approx \left[\frac{d\varphi}{dE} \right]^{-2} \cdot (D_A - D_A^{сг}). \quad (28)$$

4. КЛАССИЧЕСКИЕ И НЕКЛАССИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ СПЕКТРОМЕТРИИ

В предыдущих разделах уже затрагивался вопрос о классических и неклассических методах спектрометрии ионизирующих излучений применительно к проблеме разрешения. Рассмотрим этот вопрос более широко, опираясь на результаты предыдущих разделов.

Начиная с 60-х годов в практику измерений энергетических спектров нейтронов постепенно вошли новые методы, такие как метод шаровых замедлителей [1-3], метод фильтров [5], метод активационных детекторов [4]. Детекторы, на которых основаны эти методы были известны и раньше. Их применяли для оценки интегральных величин полей нейтронов (доз, флюенсов и т.п.), хотя были попытки также использовать их для оценки энергетических спектров [1,7]. Своим рождением в качестве спектрометрических эти новые методы обязаны развитию (тоже в 60-х годах и далее) теории и методов решения некорректных задач математической физики.

Новые спектрометрические методы имеют много общих черт, в то же время они принципиально отличаются от традиционных классических методов. Все это позволяет разделить методы измерений энергетических распределений на два основных типа: классические (традиционные) и неклассические (новые) методы. Рассмотрим в сопоставлении эти два типа методов.

Классические методы спектрометрии ионизирующих излучений базируются на измерении либо непосредственно параметров частиц (квантов) первичного излучения, либо параметров вторичных заряженных частиц - продуктов реакции первичного излучения с веществом. Измеряют, в основном, следующие параметры:

- угол отражения θ частицы (кванта) первичного излучения от кристаллической решетки (кристалл-дифракционные спектрометры);
- время пролета t частицей с ненулевой массой покоя заданного расстояния (спектрометры по времени пролета);
- длину пробега r вторичной заряженной частицы;
- амплитуду импульса V от вторичной заряженной частицы (ионизационные камеры, пропорциональные газовые счетчики, сцинтилляционные и полупроводниковые детекторы);
- величину Σ отклонения вторичной заряженной частицы в магнитном поле.

Величины θ, t, r, z, V однозначно связаны (с точностью до статистических флуктуаций) с энергией частиц (квантов) исследуемого излучения. Если обозначить измеряемый параметр буквой V , то $V = f(E)$, где $f(E)$ - известная для данного спектрометра функция. Кроме того, известна чувствительность детектора $S(E)$ (эффективность $\xi(E)$, светосила $L(E)$) и энергетическое разрешение $\eta(E) = \Delta E / E$. Знания функций $f(E)$, $S(E)$, $\eta(E)$ достаточно для восстановления энергетического спектра $\varphi(E)$ по аппаратному распределению $u(V)$ и оценки его искажения за счет конечного разрешения спектрометра.

Неклассические методы спектрометрии базируются на использовании дискретного набора из N детекторов (или дискретно модифицируемого детектора) с различными функциями чувствительности. При этом регистрируется только факт взаимодействия частицы исследуемого излучения с веществом детектора, но не происходит измерения какого-либо параметра первичной или вторичной частицы. Аппаратурный спектр представляет собой N показаний детекторов u_i , которые связаны с энергетическим спектром уравнением

$$u_i = \int_{E_0}^{\infty} K_i(E) \varphi(E) dE, \quad i = \overline{1, N}. \quad (29)$$

Функция отклика $K_i(E)$ является функцией чувствительности i -го детектора.

Чтобы получить энергетический спектр $\varphi(E)$ по данным измерений u_i , $i = \overline{1, N}$, необходимо использовать весьма сложные процедуры обработки данных.

Основные свойства любого спектрометра заключены в его функции отклика. Пусть $K_i(E, V)$ - функция отклика гипотетического спектрометра, обобщающего свойства спектрометров классического и неклассического типов, i - номер детектора, $i = \overline{1, N}$, V - измеряемый параметр частиц (квантов) первичного либо вторичного излучений.

Спектрометры классического типа. В функции отклика $K_i(E, V)$ гипотетического спектрометра вырождена переменная i и $K_i(E, V)$ редуцируется в функцию отклика $K(E, V)$. При этом для описания свойств спектрометра не надо знать детально функцию отклика, достаточно знать три величины

$$\begin{aligned}
 S(E) &= \int_{V_a}^{\infty} K(E, V) dV, \\
 f(E) &= \int_{V_a}^{\infty} V P(E, V) dV = \frac{1}{S(E)} \int_{V_a}^{\infty} V K(E, V) dV, \\
 \hat{D}(E) &= \left[\frac{df(E)}{dE} \right]^{-2} \hat{D}(V) = \left[\frac{df(E)}{dE} \right]^{-2} \left\{ \frac{1}{S(E)} \int_{V_a}^{\infty} V^2 K(E, V) dV - [f(E)]^2 \right\}
 \end{aligned} \tag{30}$$

Если интерпретировать $P(E, V) = K(E, V)/S(E)$ как плотность вероятности, то первые две величины являются соответственно нулевым (умноженным на $S(E)$) и первым начальными моментами V , а величина

$$\frac{1}{S(E)} \int_{V_a}^{\infty} V^2 K(E, V) dV = \int_{V_a}^{\infty} V^2 P(E, V) dV$$

- вторым начальным моментом V . Т.е. сведения о функции отклика исчерпываются нулевым, первым и вторым моментами V .

Спектрометрические системы, имеющие различные функции отклика, но одинаковые функции $S(E)$, $f(E)$, $\hat{D}(E)$ неразличимы в рамках классического подхода. При этом любой спектрометр можно представлять себе как классический спектрометр с функцией отклика гауссовского типа. $Q_i(E) = 1/\hat{D}(E)$ является естественным пределом информационного качества такого спектрометра. Приближенное знание функции отклика не позволяет выйти за пределы естественного информационного качества. Реальное информационное качество зависит только от статистических погрешностей аппаратного спектра, но не зависит от формы измеряемого спектра.

Спектрометры неклассического типа. В функции отклика $K_i(E, V)$ вырождена переменная V , $K_i(E, V)$ редуцируется в $K_i(E)$, $i = 1, N$. $K_i(E)$ является функцией чувствительности i -го детектора, поэтому можно считать, что

$$K_i(E) = \int_{V_a}^{\infty} K_i(E, V) dV.$$

Функции $K_i(E)$ обычно имеют сложную форму, отличны от нуля на больших участках энергетической шкалы, максимум выражен слабо. Естественное информационное качество (в классическом смысле) такого спектрометра

$$Q_i = 1/D_i,$$

где

$$D_i = \frac{\int_{E_B}^{\infty} (E - \bar{E}_i)^2 K_i(E) dE}{\int_{E_B}^{\infty} K_i(E) dE}, \quad (31)$$

$$\bar{E}_i = \frac{\int_{E_B}^{\infty} E \cdot K_i(E) dE}{\int_{E_B}^{\infty} K_i(E) dE},$$

очень плохое, т.е. близко или даже равно нулю. Требуется достаточно точно знать функцию отклика $K_i(E)$, применять сложные методы обработки, чтобы выйти за пределы естественного разрешения спектрометра и получать удовлетворительные результаты.

Вследствие этого информационное качество спектрометрической системы в целом значительно лучше естественного информационного качества самого спектрометра. В спектрометрах неклассического типа информационное качество сильно зависит от применяемых методов обработки, формы измеряемого спектра, статистических погрешностей аппаратных данных.

Спектрометры полуклассического типа. Существуют спектрометры, которые обладают чертами спектрометров классического и неклассического типов. Функция отклика таких спектрометров вырождена по i , однако $K(E, \nu)$ не имеет выраженного максимума, отлична от нуля на значительной части энергетической шкалы, обычно не является функцией разности аргументов, т.е. неприменима формула (8). Для описания функции отклика недостаточно нулевого и первых двух моментов ν (если они существуют), непригоден простой метод восстановления спектров по формуле (3).

Естественное информационное качество спектрометра (в классическом смысле) низкое и может быть равным нулю.

В спектрометре полуклассического типа хотя и происходит измерение параметра ν вторичных частиц, однако нет однозначной связи между величиной ν и энергией частиц (квантов) исследуемого излучения. Например, при рассеянии нейтрона энергии E на ядре массы A ядро отдачи может иметь энергию в пределах от нуля до $\alpha \cdot E$, где $\alpha = 4A/(1+A)^2$. Сигнал ν на выходе детектора является функцией энергии ядра отдачи $\nu = \nu(E)$, но связь ν и E имеет статистический, неоднозначный характер.

Тем не менее, так как статистическая связь между сигналом ν и энергией частицы E исследуемого излучения известна, то всегда можно найти оператор преобразования L функции отклика

$K(E, V)$ к классической колоколообразной форме

$$G(E, V) = L[K(E, V)] .$$

Спектрометрическую систему, состоящую из спектрометра полуклассического типа и средств обработки данных в виде оператора L можно рассматривать как спектрометр классического типа с функцией отклика $G(E, V)$.

Таким образом, характерной особенностью спектрометров полуклассического типа является возможность преобразования функции отклика к колоколообразной форме. К сожалению, сама процедура преобразования является некорректной задачей, что порождает значительные трудности при восстановлении спектров из аппаратурных данных. Как и в неклассических методах разрешение спектрометрической системы в целом сильно зависит от применяемых методов обработки данных, от погрешностей в аппаратурном спектре, но слабо зависит от формы измеряемого спектра.

К спектрометрам полуклассического типа можно отнести спектрометры нейтронного и гамма-излучения на основе органических сцинтилляторов, пропорциональных водородных счетчиков. Функция отклика таких спектрометров имеет вид (для нейтронов)

$$K(E, V) = \left[\frac{df(E)}{dE} \right]^{-1} \cdot S(E) \cdot \frac{\eta[E - E'(V)]}{E} ,$$

где $V = f(E)$ - функция связи энергии протона отдачи E' с амплитудой импульса V , $\eta(E - E')$ - единичная функция, $S(E)$ - чувствительность спектрометра. Оператор преобразования L можно записать следующим образом

$$L[K(E, V)] = - \frac{d}{dV} \left[\frac{df(E)}{dE} \cdot K(E, V) \right] .$$

Следует отметить, что при попытке с помощью соответствующих методов обработки выйти за пределы естественного разрешения спектрометры классического и полуклассического типов переходят в спектрометры неклассического типа. Т.е. разрешение (более корректно - информационное качество) начинает зависеть не только от статистических погрешностей аппаратурного спектра, но и от применяемых методов обработки и формы исследуемого спектра.

5. ВОЗМОЖНЫЕ ПОДХОДЫ К ОЦЕНКЕ РАЗРЕШЕНИЯ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ СИСТЕМ НЕКЛАССИЧЕСКОГО ТИПА

Выше было показано, что оценивать информационные свойства спектрометрических систем правильно по их информационному качеству или, что то же самое, по эквивалентному разрешению. В настоящем разделе под словом "разрешение" будем понимать эквивалентное разрешение.

Обозначим истинный спектр $\varphi_0(E)$, спектр, полученный в результате измерений спектрометрической системой, - $\varphi(E)$. Связь между аппаратурным спектром u_i , $i = \overline{1, N}$, и спектром $\varphi_0(E)$ выражается уравнением (29), которое в матричной форме имеет вид

$$\vec{u} = \hat{K} \vec{\varphi}_0 \quad (32)$$

В ряде методов восстановления спектров, например, таких как метод регуляризации [8] и других, строится оператор \hat{A} , с помощью которого находят измеренный спектр $\vec{\varphi}$

$$\vec{\varphi} = \hat{A} \vec{u} = \hat{A} \hat{K} \vec{\varphi}_0 \quad (33)$$

Оператор \hat{A} значительно зависит не только от компонент матрицы \hat{K} , как в классическом случае, но и от погрешностей компонент \hat{K} , от учитываемой априорной информации о спектре $\vec{\varphi}_0$, в ряде случаев от формы спектра $\vec{\varphi}_0$, от погрешностей аппаратурного спектра \vec{u} . Минимальное разрешение спектрометрической система обеспечивает для данного типа спектра и выбранного способа построения \hat{A} при близких к нулю статистических погрешностях аппаратурных данных \vec{u} . Это минимальное разрешение характеризует информационное качество системы.

Сложный оператор $\hat{A} \hat{K}$ в формуле (33) является дискретным представлением энергетической функции отклика $P(E, E')$. Информационное качество и эквивалентное разрешение можно вычислить по формуле (31), заменив в них интегралы на суммы и $K_i(E)$ на матрицу \hat{K} .

Другие методы восстановления спектров, например, метод направленного отбора, метод направленного расхождения и др. [9, 10]

основаны на итерационных и оптимизационных процедурах, в которых оператор \hat{A} в явном виде не строится. Поэтому рассмотрим другой подход к этой проблеме.

Спектрометрическая система действует на истинный спектр как некий фильтр, который убирает часть информации о $\varphi_0(E)$. В результате спектр $\varphi(E)$ становится более гладким. Информационное качество $q(E)$ спектрометрической системы характеризует прозрачность этого фильтра в области энергий E . Фильтр полностью прозрачен при $q(E) \rightarrow \infty$ и полностью непроницаем при $q(E) \rightarrow 0$.

Представим спектрометрическую систему в виде "черного ящика", на вход которого подается сигнал $\varphi_0(E)$, а на выходе снимается сигнал $\varphi(E)$. О её свойствах можно судить только на основании анализа пары спектров $\varphi_0(E)$ и $\varphi(E)$. При этом следует учесть, что система нелинейна, т.е. её свойства зависят от $\varphi_0(E)$.

Таким образом, общим подходом к оценке разрешения, независимым от типа применяемого метода восстановления, является подход, основанный на анализе пары спектров $\varphi_0(E)$ и $\varphi(E)$. Этот подход является обобщением традиционного способа измерения разрешения, когда на вход спектрометра подается спектр в виде δ -функции.

Основной характеристикой спектрометрической системы является, как было показано выше, её информационное качество $q(E)$. Оно не зависит от формы конкретной функции отклика. В ряде случаев интересно бывает знать, кроме того, тип формы функции отклика. Конечно, наиболее полную информацию дает знание формы функции отклика в деталях. Но, во-первых, получить форму функции отклика в деталях по паре спектров $\varphi_0(E)$ и $\varphi(E)$ трудно и часто невозможно (эта задача является, в свою очередь, некорректной), во-вторых, в подавляющем большинстве случаев достаточно знать величину q и тип формы функции отклика. Зная эти две величины легко оценить разрешение.

Сформулируем задачу оценки разрешения следующим образом: зная энергетический спектр $\varphi_0(E)$ (истинный) на входе спектрометрической системы и спектр $\varphi(E)$ (измеренный) на её выходе, определить информационное качество системы $q(E)$ и тип формы функции отклика, тем самым оценить величину разрешения. Определить тип формы функции отклика - означает, по существу, найти из заданного набора типов форм функций отклика такой, который в наибольшей

степени соответствует паре спектров $\varphi_0(E)$ и $\varphi(E)$.

Для оценки разрешения в классическом смысле при такой постановке задачи спектрометрическая система неклассического типа моделируется условным классическим спектрометром с заданным типом функции отклика. Параметры функции отклика должны быть такими, чтобы при воздействии условного спектрометра на $\varphi_0(E)$ отличие полученного спектра от $\varphi(E)$ было минимальным.

Пусть $\rho_m(E, E', z_m)$ - энергетическая функция отклика m -го типа условного спектрометра с набором неизвестных параметров z_m . Параметры z_m следует понимать в широком смысле, они могут быть функциями энергии, т.е. определять зависимость разрешения от энергии.

Результатом воздействия условного спектрометра на $\varphi_0(E)$ является спектр

$$\varphi_m(E) = \int_{E_B}^{\infty} \rho_m(E, E', z_m) \varphi_0(E) dE. \quad (34)$$

Представим эту формулу в матричном виде

$$\vec{\varphi}_m = \hat{\rho}_m \vec{\varphi}_0, \quad (35)$$

где $\hat{\rho}_m$ - матрица, передающая функцию отклика. Если известна ковариационная матрица \hat{C}_{φ_0} спектра $\vec{\varphi}_0$, то

$$\hat{C}_{\varphi_m} = \hat{\rho}_m \hat{C}_{\varphi_0} \hat{\rho}_m^t. \quad (36)$$

Обозначим $R_m = R[\varphi(E), \varphi_m(E)]$ функционал, определяющий интегральное уклонение спектра $\varphi_m(E)$ от $\varphi(E)$. Он может иметь различную форму, например, форму невязки

$$R_m = \int_{E_B}^{\infty} [\varphi(E) - \varphi_m(E)]^2 dE. \quad (37)$$

В матричной форме формула (37) имеет вид

$$R_m = (\vec{\varphi} - \vec{\varphi}_m)^t (\vec{\varphi} - \vec{\varphi}_m). \quad (38)$$

Оптимальная функция отклика $\rho_m(E, E', z_m)$ должна приводить к минимуму функционала R_m .

Таким образом, задача оценки разрешения в математическом плане сводится к следующей: в рамках заданных ограничений на тип и параметры функций отклика условного спектрометра найти тип m и параметры z_m , обеспечивающие минимум функционала

$$R_m \stackrel{=}{=} \min_{m, z_m}. \quad (39)$$

Например, если функция отклика m -го типа условного спектрометра является плотностью нормального распределения и её дисперсия не зависит от энергии, то параметром является $Z_m = \sigma$, информационное качество $q = 1/\sigma^2$, эквивалентное разрешение $\Delta\lambda = 2\sqrt{2\ln 2} \cdot \sigma$.

Важным вопросом является вопрос о соответствии найденного типа функции отклика условного спектрометра реальной спектрометрической системе. Вообще говоря, возможна ситуация, когда даже при минимуме R_m отклонение $\varphi_m(\varepsilon)$ от $\varphi(\varepsilon)$ недопустимо велико.

Пусть \hat{C}_φ и \hat{C}_{φ_m} ковариационные матрицы спектров $\vec{\varphi}$ и $\vec{\varphi}_m$, представленных в векторной форме. Векторы $\vec{\varphi}$ и $\vec{\varphi}_m$ можно считать статистически независимыми. Тогда, если $\vec{\varphi}$ и $\vec{\varphi}_m$ совпадают в пределах статистических погрешностей, то невязка

$$(\vec{\varphi} - \vec{\varphi}_m)^t (\vec{\varphi} - \vec{\varphi}_m) \leq \text{Sp}[\hat{C}_\varphi + \hat{C}_{\varphi_m}], \quad (40)$$

где $\text{Sp}[\hat{C}_\varphi + \hat{C}_{\varphi_m}]$ - след суммы матриц \hat{C}_φ и \hat{C}_{φ_m} . Формула (40) следует из цепочки равенств

$$\begin{aligned} \sum_i (\varphi_i - \varphi_{i,m})^2 &= \sum_i (\overline{\varphi_i + \Delta\varphi_i} - \overline{\varphi_{i,m} - \Delta\varphi_{i,m}})^2 = \sum_i (\overline{\varphi_i} - \overline{\varphi_{i,m}})^2 + \\ &+ \sum_i [(\Delta\varphi_i)^2 + (\Delta\varphi_{i,m})^2] = \sum_i (\overline{\varphi_i} - \overline{\varphi_{i,m}})^2 + \text{Sp}[\hat{C}_\varphi + \hat{C}_{\varphi_m}] \approx \text{Sp}[\hat{C}_\varphi + \hat{C}_{\varphi_m}]. \end{aligned}$$

Если недиагональные элементы матриц \hat{C}_φ и \hat{C}_{φ_m} равны нулю, то формулу (40) можно заменить на более точную

$$(\vec{\varphi} - \vec{\varphi}_m)^t (\hat{C}_\varphi + \hat{C}_{\varphi_m})^{-1} (\vec{\varphi} - \vec{\varphi}_m) \leq \chi^2_N, \quad (41)$$

где χ^2_N - статистический критерий Пирсона, N - размерность векторов $\vec{\varphi}$ и $\vec{\varphi}_m$.

В том случае, когда выполняются соотношения (40) или (41) m -ый тип функции отклика соответствует реальной спектрометрической системе в пределах статистической погрешности.

Если моделировать реальную спектрометрическую систему условным спектрометром, то необходимо найти матрицу \hat{P}_m , отображающую функцию отклика и удовлетворяющую уравнению (39) и ограничениям (40) или (41). Допустим, что такая матрица построена и по ней найдено информационное качество спектрометра $q_m(\varepsilon)$. $q(\varepsilon)$ является параметром (или выражается через параметры) функции отклика, соответственно - матрицы \hat{P} . При изменении $q_m(\varepsilon)$ на величину $\varepsilon(\varepsilon)$, т.е. $q(\varepsilon) = q_m(\varepsilon) + \varepsilon(\varepsilon)$, отклонение спектра $\vec{\varphi}_\varepsilon = \hat{P}\vec{\varphi}$ от $\vec{\varphi}$ растёт (так как $\vec{\varphi}_m$ обеспечивает минимум функционала R) и при некоторых значениях $q_m^{min}(\varepsilon)$ и $q_m^{max}(\varepsilon)$ неравенства (40)

или (4I) превращаются в равенства.

Если наложить на $\varepsilon(E)$ разумные ограничения, например, такие что $\varepsilon(E)$ не меняет знака на рассматриваемом участке спектра, является ограниченной ($|\varepsilon(E)| < C_1$) и достаточно гладкой ($|d\varepsilon(E)/dE| < C_2$) функцией, то в области $[q_m^{\min}(E), q_m^{\max}(E)]$, как правило, будет единственный минимум в точке $q(E) = q_m(E)$. Проиллюстрируем это на простейшем примере.

Пусть функция отклика является прямоугольной (см. формулу (18)). Тогда

$$\varphi(E) = \frac{1}{\Delta} \int_{E-\Delta/2}^{E+\Delta/2} \varphi_0(E') dE'.$$

Уклонение равно

$$|\Delta\varphi(E)| = |\varphi(E) - \varphi_\varepsilon(E)|,$$

$$R = R[\varphi(E), \varphi_\varepsilon(E)] = \int_{E_0}^{\infty} |\Delta\varphi(E)|^2 dE.$$

Найдем $|\Delta\varphi(E)|$ при $\Delta\varepsilon = \Delta + \varepsilon$, $|\varepsilon| < \Delta$.

$$|\Delta\varphi(E)| = \left| \frac{\varepsilon}{\Delta + \varepsilon} \cdot \left[\varphi(E) - \frac{\bar{\varphi}_0(E - \frac{\Delta + \varepsilon}{2}, E - \frac{\Delta}{2}) + \bar{\varphi}_0(E + \frac{\Delta}{2}, E + \frac{\Delta + \varepsilon}{2})}{2} \right] \right|,$$

где

$$\bar{\varphi}_0(E - \frac{\Delta + \varepsilon}{2}, E - \frac{\Delta}{2}) = \frac{2}{\varepsilon} \int_{E - \frac{\Delta + \varepsilon}{2}}^{E - \frac{\Delta}{2}} \varphi_0(E') dE',$$

$$\bar{\varphi}_0(E + \frac{\Delta}{2}, E + \frac{\Delta + \varepsilon}{2}) = \frac{2}{\varepsilon} \int_{E + \frac{\Delta}{2}}^{E + \frac{\Delta + \varepsilon}{2}} \varphi_0(E') dE'.$$

Отсюда следует

$$R = \frac{\varepsilon^2}{(\Delta + \varepsilon)^2} \int_{E_0}^{\infty} \left[\varphi(E) - \frac{\bar{\varphi}_0(E - \frac{\Delta + \varepsilon}{2}, E - \frac{\Delta}{2}) + \bar{\varphi}_0(E + \frac{\Delta}{2}, E + \frac{\Delta + \varepsilon}{2})}{2} \right]^2 dE.$$

Таким образом, $R \approx \varepsilon^2 / (\Delta + \varepsilon)^2$ и имеет один минимум в точке $\varepsilon = 0$.

Этот пример, естественно, не является доказательством, но позволяет предположить, что во многих случаях вышеприведенное утверждение является правильным.

Интервал $[q_m^{\min}(E), q_m^{\max}(E)]$ дает оценку погрешности найденного значения информационного качества $q_m(E)$.

Часто вопрос о типе функции отклика является второстепенным, важно только оценить информационное качество спектрометрической системы. Следует ожидать, что оценки информационного качества условных спектрометров с различными функциями отклика будут совпадать (в пределах статистических погрешностей), если для них выполняются соотношения (40) или (41). Но этот вопрос требует дальнейшего исследования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе приведены результаты теоретического исследования проблемы разрешения спектрометров ионизирующих излучений различных типов. Сформулирован ряд новых положений. Приведены полезные в практическом отношении формулы.

Основные результаты заключаются в следующем:

1. Введено понятие спектрометрической системы как системы, состоящей из собственно спектрометра и средств обработки данных. Показано, что в общем случае следует употреблять термин "разрешение" по отношению к спектрометрической системе в целом.

2. Введено понятие информационного качества спектрометрических систем. Доказано, что информационное качество принципиально более правильно характеризует информационные свойства спектрометрической системы, нежели традиционно употребляемое разрешение.

3. Обосновано разделение спектрометрических систем на два основных типа: классические и неклассические системы. Выделен также дополнительный тип спектрометрических систем, занимающий промежуточное положение между двумя основными типами - полуклассические системы.

4. Сформулирован подход к оценке разрешения спектрометрических систем, основанный на анализе пары спектров: истинного $\varphi_0(\epsilon)$ (на входе спектрометрической системы) и измеренного $\varphi(\epsilon)$ (на выходе системы). Этот подход является достаточно универсальным, так как не зависит от типа спектрометрической системы и её свойств, применим для нелинейных относительно спектра $\varphi_0(\epsilon)$ систем, т.е. систем, свойства которых зависят от формы $\varphi_0(\epsilon)$.

5. В рамках указанного выше подхода сформулирована задача оценки разрешения спектрометрической системы как задача определения по паре спектров $\varphi_0(\epsilon)$ и $\varphi(\epsilon)$ информационного качества и типа функции отклика системы.

Дана общая математическая формулировка задачи оценки разрешения как задачи нелинейного программирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bramblett R.L., Ewing R.I., Bonner T.W. A new type of neutron spectrometer. — *Nuclear Instruments and Methods*. 1960, v. 9, № 1, p. 1-12.
2. Семенов В.П., Трыков Л.А., Бадеев Ю.В. Мультиферный спектрометр с полупроводниковым детектором тепловых нейтронов. — *Приборы и техника эксперимента*, 1974, № 5, с. 40-43.
3. Многошаровой метод спектрометрии нейтронов на основе комбинированных замедлителей. — *Neutron Monitoring for Radiation Protection Purposes, Proc. Symp. Vienna, 1972*, Vienna, IAEA, 1973, v. 1, p. 97-111 (Андреева Л.С., Кеирим-Маркус И.Б., Савинский А.К., Успенский Л.Н., Филошкин И.В.)
4. Крамер-Агеев Е.А., Трошин В.С., Тихонов Е.Т. Активационные методы спектрометрии нейтронов. М.: Атомиздат, 1976.
5. Абрамов А.И., Казанский Ю.А., Матусевич Е.С. Основы экспериментальных методов ядерной физики. М.: Атомиздат, 1977.
6. Кульбак С. Теория информации и статистика. /Пер. с англ. М., Физматгиз, 1967.
7. Bramblett R.L., Bonner T.W. Neutron evaporation spectra from (p, n) reactions. — *Nuclear Physics*, 1960, v. 20, № 3, p. 395-407.
8. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1974.
9. Тараско М.З. Об одном методе решения линейных задач со стохастическими матрицами. — Препринт ФЭИ-156, Обнинск, 1969.
10. Семенов В.П., Трыков Л.А. Некоторые аспекты развития мультиферного метода спектрометрии нейтронов. — В сб.: "Радиационная безопасность и защита АЭС", М., Атомиздат, 1980, вып. 4, с. 120-133.

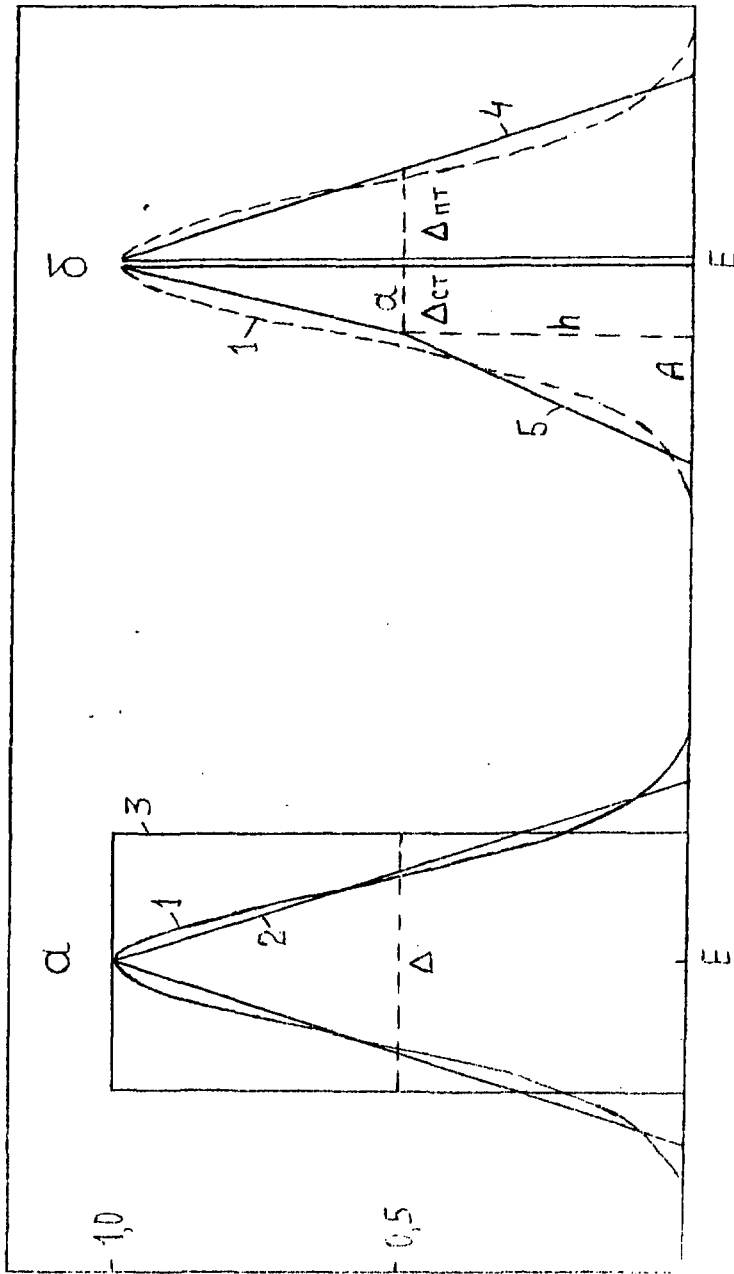


Рис. 1. Функции отклика спектрметрических систем с одинаковым Δz . 1 - плотность вероятности нормального распределения, 2 - равнобедренный треугольник, 3 - прямоугольник, 4 - прямоугольный треугольник, 5 - прямоугольный треугольник с "изломом" гипотенузы.

Технический редактор Н.П.Герасимова.

Подписано к печати 22.II.1964 г. Т-20593 Формат 60x90 I/16

Офсетная печать Усл.п.л. 1,5 Уч.-изд.л. I Тираж 80 экз.

Цена 15 коп. ФЭИ-1632 Индекс 3624 761

Отпечатано на ротапринтере ФЭИ, г. Обнинск.

15 коп.

Индекс 3624

Разрешение спектрометрических систем различных типов.
Постановка проблемы.
ФЭИ-1632, 1984, 1-24.