

герентного рассеяния и, как следствие, уширению дифракционного максимума.

4) К ухудшению разрешения приводит и то, что атомы, составляющие решетку, представляют собой, как правило, естественную смесь нескольких изотопов, имеющих различное сечение упругого рассеяния. Их случайное расположение в узлах приводит к нарушению когерентности.

5) Помимо ядерного взаимодействия нейтроны, имеющие магнитный момент, взаимодействуют с магнитными моментами атомов среды. Сила этого взаимодействия зависит от взаимных ориентаций магнитных моментов, которые являются случайными, что также вызывает уширение дифракционного максимума.

Все указанные причины приводят к тому, что реальное угловое разрешение кристаллических спектрометров составляет примерно  $10^3$ .

## Глава 8. МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ЯДЕР. ВОССТАНОВЛЕНИЕ СХЕМ РАСПАДА

Для идентификации нуклида необходимо определить его заряд и массовое число (или массу). Заряд ядра чаще всего находится химическими методами. Он может быть также определен по спектру рентгеновского излучения. При известном заряде его массу (а следовательно, и массовое число  $A$ ) можно найти по отклонению ионизованных атомов в магнитном или электрическом поле.

Полные энергии ядер в устойчивых состояниях определяются их массой. Спин, магнитные и электрические моменты ядер в устойчивых или достаточно долгоживущих состояниях определяют путем анализа атомных и молекулярных оптических спектров.

Спектрометрические методы измерения масс, спинов, электрических и магнитных моментов тесно взаимосвязаны.

В атомных спектрах наиболее сильны эффекты, обусловленные массой, затем в порядке убывания идут эффекты, обусловленные спином, магнитным дипольным и электрическим квадрупольным моментом ядра. Поэтому, как правило, при известной массе ядра можно измерить его спин, а при известных массе и спине — его магнитный дипольный момент и т.д.

Если ядро рассматривать как точечный объект с зарядом  $Z$ , то энергетические уровни электронов в поле такого ядра определяются формулой Бора. Если учесть спин электрона, то энергетический спектр атома усложняется (за счет взаимодействия между спиновым и орбитальным моментом электрона). Это так называемая тонкая структура атомных спектров. Если учесть спин ядра, то энергетический спектр атома дополнительно усложняется (за счет взаимодействия между моментами ядер и электронов). Это так называемая сверхтонкая струк-

тура атомных спектров. Методы атомной и молекулярной спектроскопии при определении спинов ядер основаны на исследовании сверхтонкой структуры оптических спектров, исследовании расщепления уровней во внешнем магнитном поле, отклонении молекулярных пучков в сильно неоднородном поле и др.

Экспериментальное исследование ядра начинается с определения спектра его энергетических уровней. Исследование энергетических уровней имеет фундаментальное значение для ядерной физики. Можно сказать, что цель исследований в области ядерной спектроскопии — установить свойства атомных ядер посредством определения полного спектра их уровней и их характеристик.

Изучение свойств конкретного уровня возможно, если в эксперименте его можно наблюдать. Это означает, что должен существовать способ получения ядер, находящихся в соответствующем энергетическом состоянии (например, ядерная реакция). О таких уровнях говорят, что они в этом эксперименте возбуждаются или заселяются. В различных способах получения ядер вероятности заселения различных уровней неодинаковы, поэтому в одних экспериментах определенные уровни проявляются, а в других — нет. Возможность заселения уровней в разных экспериментах определяется, в первую очередь, законом сохранения энергии. Например, уровень с энергией  $E$  не может заселиться в ядерной реакции, если энергия частицы  $E_4 < E$ . Вероятность заселения может быть подавлена из-за правил отбора по моменту количества движения, четности и т.д. Поэтому для детального изучения спектра состояний ядра необходимо проведение различных экспериментов. Например, при радиоактивном распаде возбуждаются лишь низколежащие уровни ядер с энергией до нескольких мегаэлектрон-вольт. Однако при этом получают наиболее точные сведения о характеристиках ядер, что важно для понимания строения ядра.

Спектр для исследуемых состояний ядер существенно расширяется при использовании ядерных реакций. Становится возможным исследовать как область более высоких состояний возбуждения, так и обнаружить ряд новых состояний с низкой энергией, которые не проявляются при радиоактивном распаде из-за правил отбора.

Сведения об энергии уровней получают в основном следующими способами: измерением энергии вторичных частиц в ядерных реакциях; измерением энергии  $\alpha$ -частиц при  $\alpha$ -распаде; измерением граничных энергий  $\beta$ -спектров; измерением энергии электромагнитных переходов между состояниями одного ядра.

Метод ядерных реакций позволяет выявить практически все уровни дочернего ядра (продукта реакции), доступные по энергетике реакций, так как совокупность ядерных реакций (кулоновского возбуждения, реакций с передачей одного и двух нуклонов и др.) менее чувствительна к особенностям состояний дочернего ядра, чем процессы радиоактивного распада. Среди различных состояний дочернего ядра



присутствует и основное состояние (например, при упругом рассеянии), следовательно, в спектре вторичных частиц имеется "головная" линия, от которой легко вести отсчет энергий возбужденных состояний.

Возможности метода ограничены техническими причинами. Точность, достигнутая в настоящее время при определении энергии вторичных частиц, низка — ширина линии в спектре частиц около 10 кэВ. Уровни часто располагаются на расстоянии меньше 30 кэВ и, таким образом, могут не разрешиться. Интенсивность многих линий настолько мала, что они с трудом обнаруживаются на большом фоне. Для возбуждения уровней тяжелых ядер или высоких уровней средних ядер необходимы быстрые первичные частицы, но при этом увеличивается ассортимент реакций и усложняются спектры вторичных частиц. Кроме того, метод не дает информации о переходах между уровнями ядра и, следовательно, в схеме распада исследуемого ядра удается установить лишь энергии уровней.

Измерение энергии  $\alpha$ -частиц при  $\alpha$ -распаде дает возможность сразу определить энергию уровней дочернего ядра, если видна  $\alpha$ -линия перехода в основное состояние. Современные магнитные альфа-спектрометры имеют ширину линии около 2 кэВ; энергии интенсивных линий измеряются с погрешностью около 100 эВ. Низкий фон альфа-спектрометров позволяет исследовать линии в  $10^6 - 10^7$  раз более слабые, чем основная.

Метод  $\alpha$ -спектроскопии также имеет ряд недостатков. Линии перехода в основное состояние не всегда наблюдаются, что усложняет определение энергии возбужденных состояний. Вероятность  $\alpha$ -распада сильно зависит от энергии распада (линии, удаленные от головной более чем на 0,5 МэВ, ослаблены в  $10^2 - 10^4$  раз), поэтому энергетический диапазон исследуемых уровней не превышает 1 МэВ. Гамма-переходы со слабозаселяемых уровней не всегда удается обнаружить, особенно если высвечивание происходит каскадом мягких  $\gamma$ -квантов, поэтому информация о переходах в таких исследованиях часто также отсутствует. Кроме того, метод применим лишь к ядрам  $Z \geq 82$  и небольшим редкоземельным элементам, неустойчивым к  $\alpha$ -распаду.

Измерение граничной энергии  $\beta$ -спектра также дает возможность определить разность масс состояний нуклидов или энергетический интервал между состояниями.

Измерение непрерывных  $\beta$ -спектров производится в основном с помощью магнитных спектрометров. Применение спектрометров с ППД ограничено из-за большого обратного рассеяния  $\beta$ -частиц, значительного  $\gamma$ -фона (в том числе и от аннигиляционных квантов), шумов ППД, что существенно искажает форму  $\beta$ -спектра и ухудшает точность определения граничной энергии. Поэтому высокоэффективные спектрометры с ППД применяют в основном для измерения  $\beta$ -спектров слабых источников.

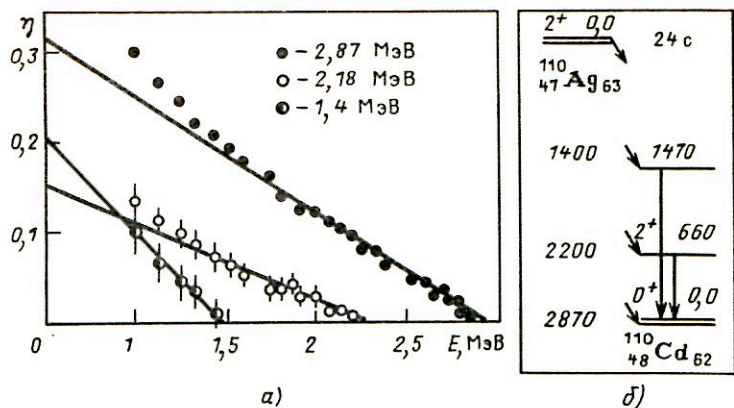


Рис. 8.1. График Ферми-Кюри для  $\beta$ -частиц, возникающих при распаде  $^{110}\text{Ag}$  (а), и фрагмент схемы распада  $^{110}\text{Ag}$  (б)

При определении граничной энергии разрешенных  $\beta$ -спектров [у которых  $s(E) = 1$ ] равенство (1.39) записывают в виде

$$\eta(E) = [N_{\pm} / (pEF)]^{1/2} = k(E_0 - E). \quad (8.1)$$

В координатах Ферми  $E$ ,  $\eta(E)$  формула (8.1) определяет прямую, пересекающую ось абсцисс в точке  $E = E_0$ , называемую графиком Ферми-Кюри.

В задачу экспериментатора входит, таким образом, подстановка полученных на спектрометре данных в (8.1) и построение графика Ферми-Кюри. При этом нет необходимости тщательного экспериментального исследования поведения  $N_{\pm}(E)$  в области, примыкающей к  $E_0$ .

В случае многокомпонентного  $\beta$ -спектра для определения граничной энергии каждой из компонент необходимо разложение графика Ферми-Кюри на составляющие. Для этого вначале график строят так же, как и для однокомпонентного спектра от верхней границы спектра. При достижении определенного значения энергии кривая отклоняется вверх от прямой линии, что указывает на присутствие второй группы  $\beta$ -частиц. Далее строят новый график Ферми-Кюри для разности  $N_2 = N - N_1$ , где  $N$  — интенсивность  $\beta$ -частиц, находимая из эксперимента;  $N_1$  — эта же величина для точек, лежащих на графике в области высоких энергий и на продолжении его в область низких энергий. Затем строят график для  $N_3 = N - (N_1 + N_2)$  и т.д., находя последовательно из полученных графиков Ферми-Кюри граничные энергии  $E_{01}$ ,  $E_{02}$ ,  $E_{03}$  и т.д. для компонент  $N_1$ ,  $N_2$ ,  $N_3$  и т.д. полного спектра  $N$ .

На рис. 8.1, а показан график Ферми-Кюри, полученный для  $\beta^-$ -распада  $^{110}\text{Ag}$ . На нем видны три компоненты полного  $\beta$ -спектра для раз-



ных граничных энергий, которые соответствуют  $\beta$ -переходам в основное и возбужденные состояния дочернего ядра (рис. 8.1, б).

Если измеряют не все компоненты  $\beta$ -спектра, а схема распада неизвестна, то для определения уровней, которые заселяются при измеряемых переходах, необходимы дополнительные исследования или сведения о схеме распада. Например, могут быть полезны дополнительные измерения  $\gamma$ -переходов.

Метод  $\beta$  —  $\gamma$ -совпадений можно использовать и для разделения компонент  $\beta$ -спектра. Например, если измерять спектр  $\beta$ -частиц при распаде  $^{110}\text{Ag}$ , совпадающих с  $\gamma$ -квантами с энергией 660 кэВ, то непрерывный  $\beta$ -спектр будет содержать только одну компоненту с граничной энергией 2,20 МэВ.

Энергию переходов между уровнями одного ядра измеряют по  $\eta$ -квантам, конверсионным электронам, электрон-позитронным парам, возникающим в переходе, или вычисляют по совокупности энергий переходов, связанных фрагментом схемы распада (по правилу Ритца). При этом заселяются только низлежащие уровни, не запрещенные правилами отбора. Такие измерения не дают прямых сведений об энергии уровней, однако если из каких-либо источников возможно узнать энергию хотя бы одного возбужденного состояния дочернего ядра, то энергии уровней также могут быть определены, причем значительно точнее, чем другими методами. Точность определения энергии можно довести до нескольких десятков электрон-вольт. Поэтому если исследование спектра частиц в ядерной реакции особенно важно для выявления уровней, то исследование спектров  $\gamma$ -квантов и конверсионных электронов необходимо для точного определения их энергии.

Энергию  $\gamma$ -квантов в настоящее время наиболее точно определяют на кристалл-дифракционных спектрометрах и спектрометрах с Ge(Li)-детекторами. Кристалл-дифракционные спектрометры в принципе позволяют измерять энергии  $\gamma$ -квантов с относительной погрешностью  $\Delta E/E = 10^{-6}$ , что соответствует абсолютной погрешности  $\pm 1$  эВ при  $E_\gamma = 1$  МэВ. Однако при  $E_\gamma \geq 300$  кэВ измерения становятся все более трудными: уменьшается брэгговский угол и убывает интенсивность брэгговского отражения.

В последние годы большинство исследований  $\gamma$ -спектров производится на спектрометрах с Ge(Li)-детекторами. Они применимы только для относительных измерений, т.е. для сравнения энергий  $\gamma$ -квантов с нормальными и реперами, и могут успешно использоваться в диапазоне энергий 0,1–1000 кэВ. Ширина линии современных спектрометров с Ge(Li)-детекторами равна  $\Delta E \approx 2$  кэВ для  $\gamma$ -квантов с энергией  $E_\gamma \approx 1$  МэВ, что обеспечивает погрешность в определении энергии в несколько десятков электрон-вольт.

Энергию конверсионных электронов  $E_e$  находят при помощи магнитных бета-спектрометров, а также спектрометров с Si(Li)-детекторами. На магнитных спектрометрах определяют произведение  $B\rho$ ,

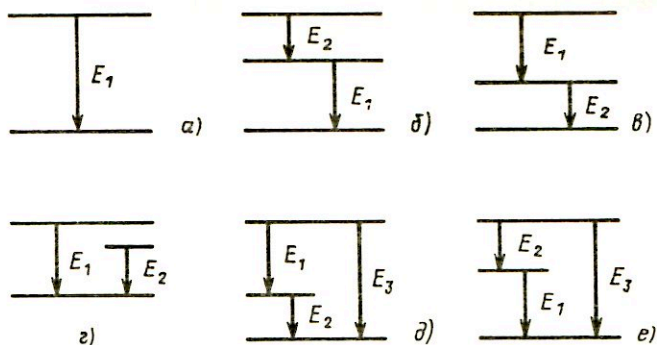


Рис. 8.2. Построение схем уровней на основе энергетике переходов:

*a* – при одном переходе; *б–г* – при двух переходах; *д, е* – при трех переходах

где  $B$  – индукции магнитного поля, а  $\rho$  – радиус кривизны траектории электрона при движении его в плоскости, перпендикулярной  $B$ . Тогда энергию  $E_e$  можно определить по формуле

$$E_e = mc^2 \left\{ \sqrt{\left(\frac{e}{mc^2}\right)^2 (B\rho)^2 + 1} - 1 \right\}. \quad (8.2)$$

Измерения можно считать абсолютными, если измерены  $B$  и  $\rho$ , поскольку универсальные константы известны с большой точностью. Только для немногих конверсионных линий произведены абсолютные измерения  $B\rho$ , а относительные измерения производятся с погрешностью около  $10^{-5}$ .

Для определения энергии переходов по измеренным энергиям  $\gamma$ -квантов и конверсионных электронов необходимо учесть энергию отдачи и другие поправки [см. (1.18), (1.19)].

Энергию перехода можно найти по фрагменту схемы распада (правило Ритца). В схемах распада с каскадным переходом (рис. 8.2) энергию жесткой линии можно определить по каскаду. Если  $\sqrt{\sigma_{E_1}^2 + \sigma_{E_2}^2} < \sigma_{E_3}$ , то нахождение  $E_3$  по каскаду точнее прямого определения. Однако при этом нужно иметь достаточную уверенность, что каскад существует и что в линиях переходов  $E_1$  и  $E_2$  нет примесей, которые могут привести к смещению максимумов.

На основе энергетике переходов можно построить схемы уровней. Если число переходов  $N$  не слишком велико ( $N < 100$ ), то схемы уровней могут быть построены после определения энергии переходов. С ростом числа переходов возможности метода ухудшаются – выявление всех наборов уровней становится затруднительным (число вариантов



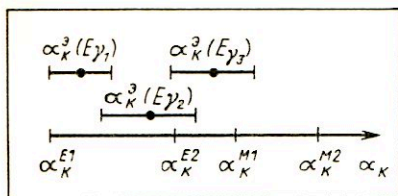


Рис. 8.3. К определению мультипольности по коэффициентам внутренней конверсии

растет примерно пропорционально  $N^3$ ), увеличивается вероятность случайных энергетических совпадений. Задача существенно упрощается при наличии каскадных переходов (для них должны удовлетворяться соотношения  $E_i + E_j = E_k$  или  $E_i + E_j = E_k + E_l$  и т.д.), а также с привлечением дополнительного анализа на  $\gamma$ - $\gamma$ -совпадение, соотношение мультипольностей, сравнение интенсивности конкурирующих переходов и т.д.

Рассмотрим несколько примеров.

1. При распаде обнаружен один переход  $E_1$  ( $N = 1$ ). Можно предложить единственную схему (рис. 8.2, а).

2. Обнаружены два перехода:  $E_1 \pm \sigma_1$ ,  $E_2 \pm \sigma_2$ . Возможны три схемы уровней (рис. 8.2, б - з).

Для исключения какой-либо из схем необходим дополнительный анализ. Например, наличие  $\gamma$ - $\gamma$ -совпадений исключает схему на рис. 8.2, з, значительное превышение интенсивности первого перехода над вторым ( $I_{E_1} \gg I_{E_2}$ ) исключает схему на рис. 8.2, в.

3. При трех переходах можно составить 16 схем. В этом случае можно провести анализ на наличие каскада, сравнивая соотношение энергий переходов  $E_i + E_j - E_k$  с погрешностью его определения  $\sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2}$ . При наличии каскада  $E_1 \rightarrow E_2$ , перекрываемого переходом  $E_3$ , останутся лишь две схемы (рис. 8.2, д, е).

Мультипольность переходов  $L$  чаще всего находят либо по коэффициентам внутренней конверсии (КВК)  $a_i$ , либо по относительным интенсивностям двух и более конверсионных линий  $K : L_1 : L_2 \dots$ , либо по угловым корреляциям  $\gamma\gamma$  ( $\Theta$ ) или  $\gamma e$  ( $\Theta$ ).

Рассмотрим определение  $L$  на примере абсолютных измерений  $a_i$ . Значение  $a_i^{E1}$ ,  $a_i^{E2} \dots$  чистых мультиполей при известных значениях заряда ядра  $Z$  и энергии перехода  $E_{\Pi}$  могут быть рассчитаны. После этого задача определения  $L$  заключается в сравнении значений  $a_i^{E1}$ ,  $a_i^{E2} \dots$  с экспериментально определенным значением  $a_i^3$  для перехода с неизвестной мультипольностью. На рис. 8.3 приведены примеры ситуаций для трех возможных переходов с  $E_{\gamma} > 100$  кэВ в ядре с  $Z = 70$ .

Если не рассматривать компоненты  $E0$  и ограничиться двойными смесями, то результаты будут следующие.

Значение  $a_K^3(E_{\gamma 1})$  соответствует либо чистой мультипольности  $E1$ , либо смеси  $E1 + M2$ . Четность перехода отрицательная:  $\pi_i \pi_j = -1$ .

Значение  $\alpha_K(E_{\gamma_2})$  может соответствовать либо чистому  $E2$ -переходу, либо смеси  $E1 + M2$  или  $M1 + E2$ .

Результат  $\alpha_K^{\text{э}}(E_{\gamma_3})$  соответствует либо чистой мультипольности  $E2$  или  $M1$ , либо смешанной  $E1 + M2$  или  $M1 + E2$ . О четности перехода в двух последних случаях ничего сказать нельзя.

КВК определяют несколькими методами. Наиболее прямым является сравнение интенсивностей электронов внутренней конверсии  $I_e$  и интенсивностей  $\gamma$ -квантов  $I_\gamma$  и далее

$$\alpha = I_e/I_\gamma = \alpha_K + \alpha_L + \dots \quad (8.3)$$

Однако этот метод довольно сложный, он требует знания с достаточно высокой точностью светосилы двух спектрометров, что не всегда возможно, поэтому большинство измерений КВК выполняется относительным методом. Для сравнения используют переходы с хорошо известными КВК. В ядрах с четным массовым числом имеются переходы типа  $I^\pi \rightarrow 0$  и  $0 \rightarrow I^\pi$ , а с нечетным  $A - 1/2 \rightarrow 1/2$ , у которых мультипольность "чистая" и, следовательно, КВК могут быть вычислены непосредственно из теоретических соображений. Существуют таблицы переходов с наиболее точно определенными КВК. Все эти переходы используют как эталонные для относительных измерений КВК. Определение КВК относительным методом заключается в следующем. Подбирают источники, в которых изучаемый и эталонный переходы имеют близкие энергии и интенсивности. В конверсионном спектре сравнивают интенсивности конверсионных линий изучаемого и эталонного переходов (через площади конверсионных линий с учетом фона, светосилы и т.д.). При этом используют магнитные спектрометры или спектрометры с ППД. В  $\gamma$ -спектре находят отношения интенсивностей  $\gamma$ -линий изучаемого и эталонного переходов  $I_\gamma/I_\gamma^{\text{эТ}}$  (через площади пиков полного поглощения с учетом фона, светосилы и т.д.). При этом используют спектрометры с Ge(Li)- или NaI(Tl)-детекторами. КВК вычисляется по формуле

$$\alpha = \frac{I_e}{I_e^{\text{эТ}}} \frac{I_\gamma^{\text{эТ}}}{I_\gamma} \alpha^{\text{эТ}} \quad (8.4)$$

В отдельных случаях удобными оказываются другие методы. Например, если имеется всего одна группа  $\beta$ -частиц, сопровождаемая каскадом конвертируемых  $\gamma$ -переходов, то коэффициенты конверсии могут быть определены по суммарному спектру  $\beta$ -частиц и конверсионных электронов. Так, для схемы распада, изображенной на рис. 8.4,  $\alpha$ , по площади конверсионных линий можно определить их суммарную интенсивность  $I_e = I_{e1} + I_{e2}$ . После вычитания конверсионных линий по оставшейся площади под кривой  $\beta$ -спектра можно определить интен-



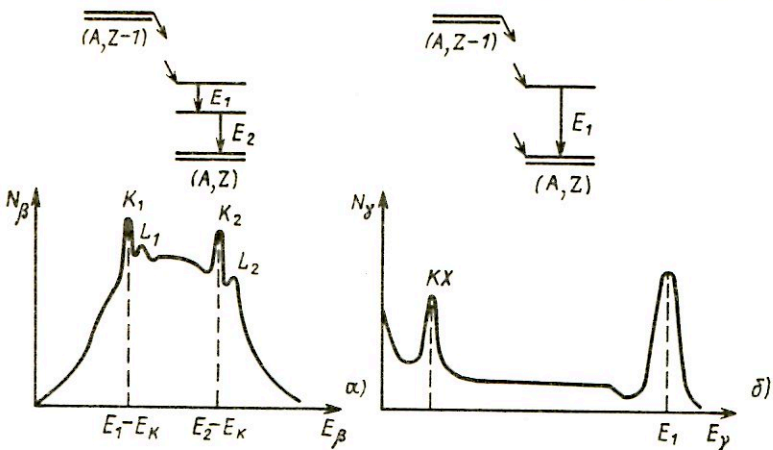


Рис. 8.4. К определению коэффициентов внутренней конверсии по спектру электронов и  $\beta$ -частиц (а) и по спектру рентгеновского и  $\gamma$ -излучения (б). Над спектрами приведены фрагменты возможных схем распада

сивность  $\beta$ -перехода

$$I_{\beta} = I_{e1} + I_{\gamma1} = I_{e2} + I_{\gamma2}$$

и интенсивность  $\gamma$ -линий

$$I_{\gamma1} = I_{\beta} - I_{e1}; \quad I_{\gamma2} = I_{\beta} - I_{e2}.$$

Отсюда суммарный КВК

$$\alpha_1 = I_{e1}/(I_{\beta} - I_{e1}); \quad \alpha_2 = I_{e2}/(I_{\beta} - I_{e2}), \quad (8.5)$$

а КВК на  $i$ -й оболочке

$$\left. \begin{aligned} (\alpha_i)_1 &= (I_{ei})_1/[I_{\beta} - (I_{ei})_1]; \\ (\alpha_i)_2 &= (I_{ei})_2/[I_{\beta} - (I_{ei})_2]. \end{aligned} \right\} \quad (8.6)$$

Если за  $\alpha$ - или  $\beta$ -распадом следует всего один  $\gamma$ -переход (рис. 8.4, б), то КВК может быть найден по отношению интенсивностей рентгеновской и  $\gamma$ -линий. Этот метод наиболее прост, так как он основан на измерении интенсивности рентгеновских и  $\gamma$ -квантов одним и тем же спектрометром [например, с Ge(Li)-детектором]. Если через  $I_K$  обозначить суммарную интенсивность всех рентгеновских линий  $K$ -серии, то

$$\alpha_K = I_K/(I_{\gamma} W_K), \quad (8.7)$$

где  $W_K$  — выход флюоресценции  $K$ -серии. Для более сложных схем распада применение последних двух методов становится затруднительным.

Спины ядер в состояниях с малым временем жизни определяют относительно спинов долгоживущих состояний ядерными методами. Спин одного из состояний может быть найден по мультипольности  $L$ -перехода, если спин другого состояния известен. Пусть, например, спин конечного состояния  $I_K$  известен и равен 0. Тогда из правил отбора следует  $I_N \leq L \leq I_N$ , т.е.  $I_N = L$ . Такой переход должен являться чистым мультиполем  $EL$  или  $ML$ , так как оба состояния запрещены по четности, а смеси запрещены однозначностью мультипольности. Мультипольность такого перехода может быть рассчитана или определена экспериментально. Если спин известного состояния отличен от нуля, то вывод становится неоднозначным и задача существенно усложняется.

Из ядерных реакций с передачей нуклона спины находят по орбитальному моменту  $l$  перешедшего нуклона и известному спину начального состояния. Например, если  $I_N = 0$ , то  $I_K = l \pm 1/2$ ; если  $l = 0$ , то  $I_K = I_N \pm 1/2$ , где  $1/2$  — спин перешедшего нуклона. В других случаях ( $I_N \neq 0, l \neq 0$ ) решение также неоднозначно.

Возможные, значения спина могут быть определены по  $lg ft$  при  $\beta$ -распаде, скорость которого зависит от спина и четности перехода. Так, если  $lg ft < 4,5$ , то спины начального и конечного состояний одинаковы.

Задача определения спина по угловым корреляциям (по анизотропии пространственного распределения излучения, испущенного ориентированными по направлениям спинов ядрами) достаточно сложна и сводится к выдвиганию гипотез и проверке следствий.

Четность может быть найдена из измерений линейной поляризации  $\gamma$ -квантов, из исследований поляризационных явлений в ядерных реакциях, по мультипольности перехода в состояние с известной четностью, по угловому моменту перешедшего нуклона и известной четности одного состояния в ядерных реакциях с передачей нуклона, по значению  $lg ft$  и т.д. Например, если известна четность  $\pi_K$  конечного состояния перехода мультипольностью  $L$  (или реакции с передачей нуклона с угловым моментом  $l$ ), то четность начального состояния определяют из правил отбора по четности:  $\pi_N = \pi_K (-1)^{L+1}$  для магнитного перехода или  $\pi_N = \pi_K (-1)^L$  для электрического перехода (или  $\pi_N = \pi_K$ , если  $l$  четно, и  $\pi_N = -\pi_K$ , если  $l$  нечетно). Экспериментально установлено, что если  $lg ft < 5$ , то  $\pi_N = \pi_K$ .

Методы нахождения времени жизни состояний  $\tau$ , постоянных распада  $\lambda$  или периодов полураспада  $T_{1/2}$ , связанных соотношениями (1.2), можно разделить на прямые и косвенные.

Прямые методы основаны на исследовании закона радиоактивного распада [см. формулы (1.3), (1.4)]. К ним относятся: непосредственное измерение спадания интенсивности излучения; сравнение числа ~~записанных~~ уровней со скоростью их распада; измерение интервалов вре-



мени между заселением уровня и его распадом; исследование ядер отдачи; использование эффекта теней и др.

Спад интенсивности излучения  $I(t)$ , сопровождающего распад исследуемого состояния, исследуют по соответствующему спаду интенсивности сигналов  $n(t)$  на установке, регистрирующей это излучение:

$$n(t) = LI_{\text{ч}} \lambda N_0 \exp(-\lambda t), \quad (8.8)$$

где  $L$  — светосила установки;  $I_{\text{ч}}$  — выход регистрируемого излучения при распаде исследуемого состояния.

Постоянная распада может быть определена, таким образом, из двух измерений. Для получения более точных значений  $\lambda$  снимают несколько экспериментальных точек  $n(t_i)$ ,  $t_i$ , где  $i = 1, 2, \dots, m$ . Точки аппроксимируют прямой в полулогарифмическом масштабе, тангенс угла наклона которой определяет постоянную распада  $\lambda$ , а время, за которое интенсивность убывает в 2 раза, — период полураспада  $T_{1/2}$  (см. рис. 1.3).

Если исследуют уровни, имеющие очень большие времена жизни, то число  $N_0$  таких уровней, заселяемых в ядерной реакции в течение времени  $\Delta\tau_{\text{п}} \ll T_{1/2}$ , можно установить по плотности потока  $\varphi$  частиц, вызывающих реакцию, по сечению  $\sigma$  возбуждения данного уровня и числу облучаемых ядер  $N_{\text{я}}$ :

$$N_0 = \varphi \sigma N_{\text{я}} \Delta\tau_{\text{п}}. \quad (8.9)$$

Тогда  $\lambda$  непосредственно находят по формуле (8.8) при  $\lambda t \ll 1$  (что нетрудно выполнить для достаточно долгоживущих состояний). Из (8.8) получаем:  $\lambda = n(t)/(LI_{\text{ч}}N_0)$ .

Эта два метода являются наиболее распространенными. С их помощью измеряют времена жизни  $\tau \geq 10^{-10}$  с. Если  $\tau$  больше нескольких минут, измерения не представляют трудностей. Если  $10^{-4}$  с  $\leq \tau \leq 1 \div 10$  мин, необходимы системы быстрой транспортировки образца из-под пучка к детектору (пневмопочты, быстро двигающие ленты и т.д.).

При  $10^{-10}$  с  $\leq \tau \leq 10^{-4}$  с измерения проводят на пучке. Нижняя граница измеряемых  $\tau$  определяется длительностью импульса тока пучка  $\Delta\tau_{\text{п}}$ , которая может быть  $10^{-9}$  с. Если измерения проводят в течение времени  $\Delta t$  (цена канала временного анализатора) между импульсами тока пучка, то при условии  $\Delta\tau_{\text{п}} \ll \tau \ll \tau_{\text{п}}$  (где  $\tau_{\text{п}}$  — интервал времени между импульсами тока пучка) интенсивность регистрируемых сигналов будет изменяться по закону (8.8), где  $N_0$  определяется по (8.9).

Если условия  $\tau \ll \tau_{\text{п}}$  не выполняются, то вклад в  $n(t)$  будут давать все предыдущие импульсы тока пучка и в этом случае

$$\begin{aligned} n(t) &= LI_{\text{ч}} N_0 \sum_{n=0}^{\infty} \lambda \exp[-\lambda(t + n\tau_{\text{п}})] = \\ &= LI_{\text{ч}} N_0 \lambda \exp(-\lambda t) / [1 - \exp(-\lambda\tau_{\text{п}})]. \end{aligned} \quad (8.10)$$

Интервал времени между моментом заселения уровня и моментом его распада устанавливают по излучению, которое, как правило, сопровождается заселением и распад (момент заселения может также отсчитываться по импульсу, синхронизированному с импульсом тока пучка ускорителя). Излучение регистрируется детекторами, импульсы с которых и подлежат анализу.

Этим методом измеряют времена жизни в интервале  $10^{-4}$  с —  $10^{-11}$  с. Ограничения со стороны больших времен связаны со статической природой метода совпадений (необходимо сохранить удовлетворительное отношение числа истинных совпадений к числу случайных за разумное время измерений). Ограничения со стороны малых времен связаны с достижимым разрешающим временем аппаратуры.

Распределение временных интервалов между импульсами исследуется либо методом задержанных совпадений, либо с использованием вреямплитудных преобразователей (ВАП). В первом случае сигналы подаются на схему совпадений, в один из каналов которой вводится переменная задержка, и получается зависимость числа совпадений от величины задержки. При этом часто используют схемы "быстро-медленных" совпадений, в которых функции энергетического и временного анализа разделены, что значительно улучшает временную разрешающую способность метода и позволяет довести ее до наносекундной области.

Наибольшее распространение в настоящее время получил метод с использованием ВАП, в котором временные интервалы преобразуются в импульсы с амплитудой, пропорциональной длительности временных интервалов. Собственное разрешение быстрых ВАП составляет несколько пикосекунд. Предельное временное разрешение метода задержанных совпадений определяется временным разбросом сигналов, поступающих от детекторов. Временное разрешение полупроводниковых детекторов около  $10^{-9}$  с, органических сцинтилляторов около  $10^{-10}$  с.

Независимо от метода временного анализа время жизни находят из кривой совпадений. При идеальной разрешающей способности аппаратуры (разрешающее время  $\tau_0 = 0$ ) временное распределение числа совпадений имело бы вид обычной кривой радиоактивного распада (рис. 8.5, а)

$$W(t) = \exp(-t/\tau)/\tau. \quad (8.11)$$

В реальных условиях разрешающего времени аппаратуры, сравнимого с временем жизни уровня, на вид кривой совпадений  $F(t)$  существенное влияние оказывает спектр мгновенных совпадений  $p(t)$  (рис. 8.5, б, в), характеризующий временную разрешающую способность аппаратуры.

Если фон случайных совпадений мал, т.е.  $F(t) \gg p(t)$ , то для анализа спектров совпадений используют метод экспоненты [ $\tau$  опреде-



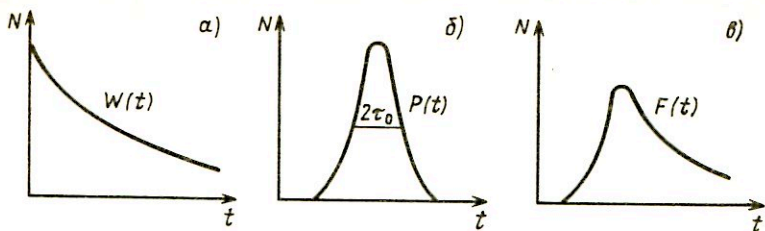


Рис. 8.5. Кривые совпадений:

а - при  $\tau_0 \ll \tau$  (кривая распада); б - при  $\tau \ll \tau_0$  (кривая характеризует разрешающее время аппаратуры); в -  $\tau \approx \tau_0$  (реальные условия разрешающего времени аппаратуры  $2\tau_0$ , сравнимого с временем жизни  $\tau$ )

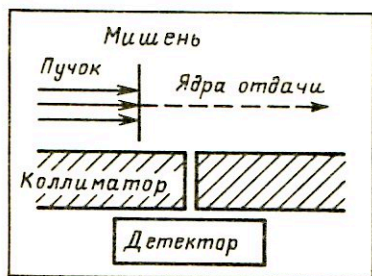


Рис. 8.6. Схема эксперимента для измерения времени жизни методом ядер отдачи

ляют по экспоненциальному спаду кривой  $F(t)$ ]. Если  $\tau \geq 1,3\tau_p$  (где  $\tau_p$  - время, характеризующее крутизну спада кривой мгновенных совпадений вблизи ее основания), то метод экспоненты дает достаточно надежные результаты. Когда время жизни  $\tau$  заметно меньше разрешающего времени аппаратуры  $2\tau_0$  и меньше времени  $\tau_p$ , используют метод моментов, впервые разработанный Беом.

Времена жизни в диапазоне  $10^{-7} - 10^{-15}$  с устанавливают методом ядер отдачи. Если исследуемое состояние образуется в ядерной реакции на тонкой мишени или в тонком радиоактивном источнике при  $\alpha$ -распаде, то ядра отдачи могут вылетать из мишени и двигаться в вакууме. Изучая зависимость числа распадов исследуемого состояния от пройденного ядром отдачи расстояния в вакууме, можно определить среднее расстояние, проходимое им до распада. Зная из кинематики процесса скорость ядра отдачи  $v$ , определяют среднее время жизни состояния.

Схема эксперимента показана на рис. 8.6. Детектор и коллиматор установлены под углом  $90^\circ$  к направлению пучка. Мишень может перемещаться относительно коллиматора параллельно пучку. При этом интенсивность частиц, сопровождающих переход и поступающих в детектор, изменяется по закону

$$I(x) = I_0 \exp[-x/(\tau v)], \quad (8.12)$$

где  $x$  — расстояние от мишени до коллиматора;  $v$  — скорость ядра отдачи. Минимальное измеряемое время жизни  $\tau$  зависит от максимального значения скорости  $v$  и разрешения по расстоянию  $\Delta x$ . При  $v \sim 3 \cdot 10^9$  см/с,  $\Delta x \sim 10^{-3}$  см с достаточной точностью измеряются времена  $\tau \sim 10^{-13}$  с.

Вместо измерения среднего расстояния, проходимого ядром отдачи до распада, можно находить ослабление доплеровского сдвига энергии исследуемого излучения за счет торможения ядра отдачи в материале подложки мишени. Если время исследуемого состояния ядра отдачи сравнимо с временем торможения в материале мишени, то излучение будет испускаться ядрами отдачи, движущимися со скоростью  $v$ , меньшей скорости  $v_0$ , с которой образуются ядра отдачи.

Найдя экспериментально фактор ослабления доплеровского сдвига, который зависит от отношения времени жизни к времени торможения, можно определить время жизни состояния. Диапазон времен жизни, доступный для измерения этим методом, лежит в области  $10^{-11} - 10^{-14}$  с.

Если ядра отдачи движутся в вакууме в направлении первичного пучка частиц вплоть до встречи с подвижным поглотителем-плунжером, то часть ядер излучает на лету, испуская, например,  $\gamma$ -кванты со средней энергией

$$E_{\gamma} = E_{\gamma_0} (1 + (\bar{v}_0/c) \cos \Theta), \quad (8.13)$$

где  $\bar{v}_0$  — средняя скорость ядер отдачи;  $\Theta$  — угол между направлением движения ядер отдачи и направлением движения  $\gamma$ -квантов. Другая часть возбужденных ядер, которая распадается, достигнув поглотителя, испускает  $\gamma$ -кванты с энергией  $E_{\gamma_0}$ , примерно равной энергии перехода. В спектре  $\gamma$ -квантов в этом случае наблюдаются две отдельные стоящие линии. Исследуя отношение интенсивности этих линий в зависимости от расстояния  $x$  между мишенью и плунжером

$$N_0/(N_0 + N) = \exp[-x/(v\tau)], \quad (8.14)$$

где  $N$ ,  $N_0$  — интенсивности  $\gamma$ -квантов с энергией  $\bar{E}_{\gamma}$  и  $E_{\gamma_0}$ , можно определить время жизни состояния.

Измерение времен жизни в диапазоне  $10^{-16} - 10^{-18}$  с возможно с использованием эффекта теней, открытого А.Ф. Тулиновым в 1965 г.

Времена жизни вплоть до  $10^{-20}$  с определяют косвенными методами. Основной для косвенных измерений времени жизни служит зависимость естественной ширины уровней  $\Delta E_e$  от времени жизни, вытекающая из соотношения неопределенности  $\Delta E \tau = \hbar$ . Если ширину уровня выражать в электрон-вольтах, то его время жизни в секундах

$$\tau = 6,58 \cdot 10^{-16} / \Delta E. \quad (8.15)$$

Если измеряется парциальная ширина уровня  $\Delta E_{ei}$  по отношению к



$i$ -переходу, то вычисляется парциальное время жизни  $\tau_i$ . Измерения ширины уровней проводят методами ядерной резонансной флюоресценции, резонансных ядерных реакций и др.

## Глава 9. ОБРАБОТКА НЕПРЕРЫВНЫХ СПЕКТРОВ

### 9.1. Основное уравнение

В результате регистрации спектрометром частицы с энергией  $E$  на его выходе возникает и фиксируется сигнал, характеризуемый некоторой величиной  $x$ , связанной с  $E$ . Такой величиной может быть амплитуда импульса на выходе детектора, угол отклонения заряженной частицы в магнитном поле, номер детектора при регистрации спектра набором детекторов с различающимися характеристиками и т.п.

Идеальной была бы ситуация, при которой величины  $x$  и  $E$  связаны взаимно однозначной зависимостью, т.е.  $x = f(E)$ . Тогда по совокупности сигналов  $x$  можно было бы однозначно определить энергии  $E$  и по ним оценить спектр  $\Phi(E)$ . Такой гипотетический спектрометр можно было бы назвать идеальным. Как отмечалось в предыдущих главах, существует много причин, приводящих к неоднозначной связи между сигналом  $x$  и энергией  $E$ . Важнейшей из них является стохастический характер физических процессов в спектрометре, приводящих к регистрации частиц. В частности, к сигналу  $x$  может добавляться шум, не связанный своим происхождением с частицами. Неоднозначность может также возникнуть вследствие некоторых особенностей конструкции спектрометра, например, в результате дискретизации совокупности сигналов  $x$ . Следствием сказанного является тот факт, что связь между величинами  $x$  и  $E$  носит вероятностный характер.

Обозначим  $G(x, E)$  для случая непрерывного  $x$  условную плотность вероятности того, что в результате регистрации частицы с энергией  $E$  сигнал будет равен  $x$  [т.е.  $G(x, E)dx$  есть вероятность понаблюдать сигнал в интервале  $(x, x + dx)$ ]. Как указывалось в гл. 1, функция  $G(x, E)$ , рассматриваемая как функция аргумента  $x$ , называется функцией отклика спектрометра.

Если величина  $x$  дискретна, т.е., по существу имеется  $n$  изолированных выходов (каналов) спектрометра, то можно ввести функцию  $G_i(E)$  ( $i = 1, \dots, n$ ), представляющую собой вероятность появления сигнала на  $i$ -м выходе при регистрации частицы с энергией  $E$ . Эта функция (от аргумента  $E$ ) называется спектральной характеристикой  $i$ -го выхода (канала)\*. На практике функция  $G(x, E)$  определяется в спе-

\* Для непрерывного  $x$  можно также рассматривать  $G(x, E)dx$  как функцию аргумента  $E$  при фиксированном  $x$  и считать ее "спектральной характеристикой канала  $(x, x + dx)$ ".

циальных так называемых калибровочных экспериментах или рассчитывается теоретически. Для успешного решения спектрометрических задач она должна быть хорошо известна.

Наиболее типичные примеры функций отклика и спектральных характеристик, встречающихся в задачах ядерной спектрометрии, были рассмотрены ранее. Здесь мы только повторим, что как функция отклика, так и спектральная характеристика должны учитывать все факторы, влияющие на вероятность появления сигнала: геометрические, связанные с поглощением и рассеянием частиц в среде, определяемые эффективностью преобразования энергии и др.

В результате регистрации частиц со спектром  $\Phi(E)$  в случае непрерывного  $x$  будет получено некоторое распределение сигналов  $U(x)$ , которое будем называть дифференциальным **аппаратурным спектром**. По определению, аппаратурный спектр представляет собой случайную функцию  $U(x)$ , такую, что для данного  $\Delta x$  величина  $U\Delta x$  есть число сигналов (случайное), зарегистрированных спектрометром в диапазоне  $(x - \Delta x/2, x + \Delta x/2)$ . Отметим две особенности данного определения: 1) значение  $U(x)$  зависит от выбора  $\Delta x^*$ ; 2)  $U(x)$  — случайная функция (причина этого — стохастический характер регистрации частиц спектрометром).

Для дискретного  $x$  аналогом аппаратурного спектра является набор величин  $U_i$ , каждая из которых представляет собой число сигналов, зарегистрированных в  $i$ -м канале (выходе).

Для каждой из случайных величин  $U(x)$  и  $U_i$  могут быть введены соответствующие средние значения  $\overline{U(x)}$  и  $\overline{U_i}$ , которые можно назвать средними аппаратурными спектрами. С помощью этого понятия можно дать еще одно определение функции отклика. Легко видеть, что  $G(x, E)$  есть нечто иное, как средний аппаратурный спектр, соответствующий моноэнергетическому спектру единичной мощности с энергией  $E$ :  $\varphi(E) = \delta(E' - E)$ . Такое определение носит более общий характер, так как оно не связано с вероятностной интерпретацией функции отклика. В этом случае можно считать  $G(x, E)$  детерминированной функцией достаточно общего вида, осуществляющей преобразование истинного спектра в аппаратурный, а вероятностный характер процесса регистрации можно формально учесть путем анализа флуктуаций выходного сигнала  $U(x)$ . Такой подход особенно полезен, когда в спектрометре не регистрируется каждая детектируемая частица, а используются усредненные аналоговые методы регистрации.

Нашей ближайшей целью будет установление связи между величинами  $\Phi(E)$ ,  $G(x, E)$  и  $\overline{U(x)}$ ,  $\overline{U_i}$ . Далее предполагается, что рассматри-

---

\*Эта зависимость весьма существенна. При достаточно больших  $\Delta x$   $U(x)$  может быть в целом плавной функцией, но при малых  $\Delta x$  она становится крайне нерегулярной, стремясь в пределе  $\Delta x \rightarrow 0$  к линейной комбинации  $\delta$ -функций.



ваемые нами спектрометры являются линейными приборами. Это означает, что если спектрам  $\Phi_k(E)$  соответствуют средние аппаратурные спектры  $\bar{U}_k(x)$ , то спектру, являющемуся линейной комбинацией  $\sum a_k \Phi_k(E)$  ( $a_k$  — константы), соответствует средний аппаратурный спектр  $\sum a_k \bar{U}(x)^*$ .

Поскольку справедливо тождество

$$\Phi(E) = \int_0^{\infty} \delta(E' - E) \Phi(E') dE', \quad (9.1)$$

а спектру  $\delta(E' - E)$  соответствует средний аппаратурный спектр  $G(x, E)$ , то вследствие линейности спектрометра спектру  $\Phi(E)$  соответствует средний аппаратурный спектр

$$\bar{U}(x) = \int_0^{\infty} G(x, E) \Phi(E) dE \quad (9.2)$$

(штрих при  $E$  опущен). Аналогичное соотношение имеет место для дискретного случая

$$\bar{U}_i = \int_0^{\infty} G_i(E) \Phi(E) dE. \quad (9.3)$$

Основная задача восстановления спектров заключается в отыскании спектра  $\Phi(E)$  по известным функциям  $G(x, E)$  и  $\bar{U}(x)$  [соответственно  $G_i(E)$  и  $\bar{U}_i$ ]. Функция  $\bar{U}(x)$  ( $\bar{U}_i$ ) обычно бывает неизвестна, и вместо нее приходится использовать экспериментальное значение  $U(x)$  ( $U_i$ ), которое предполагается достаточно близким к среднему значению. В результате мы вынуждены решать уравнение Фредгольма первого рода

$$U(x) = \int_0^{\infty} G(x, E) \Phi(E) dE, \quad (9.4)$$

соответственно

$$U_i = \int_0^{\infty} G_i(E) \Phi(E) dE, \quad (9.5)$$

---

\* Во избежание недоразумений заметим, что указанная линейность не имеет никакого отношения к линейности спектрометрического тракта, т.е. к пропорциональности в среднем между  $x$  и  $E$ .

относительно  $\Phi(E)$ . Поскольку  $U(x)$  известно неточно, то и решение этого уравнения (если оно получено) также будет представлять не точную функцию  $\Phi(E)$ , а лишь ее приближение (оценку). Возможности решения такого уравнения рассматриваются в § 9.2 и далее.

## 9.2. Существование, единственность и устойчивость решения

Величины, входящие в уравнения (9.2) и (9.3), являются отражением некоторой реальности, и поэтому для физика, занимающегося обработкой спектров, вопрос о существовании решения уравнения (9.4) часто кажется лишенным практического смысла. Спектр реально существует, и поэтому не должно быть сомнения в существовании решения. Более внимательный подход к проблеме показывает, однако, что подобная позиция физика базируется на его интуитивной уверенности, что он правильно понимает работу спектрометра. На практике же часты случаи, когда из поля зрения ускользают некоторые детали работы спектрометра. Так, например, функция отклика может быть определена для одних условий работы спектрометра, а аппаратный спектр измеряется в других условиях. Может нарушаться условие линейности в результате, скажем, наложения импульсов от детекторов друг на друга. Поэтому в правую и левую части уравнения (9.4) подставляют неадекватные друг другу величины, и может случиться, что решение не будет существовать. Если в уравнение (9.4) вместо точного среднего значения  $U(x)$  подставить случайное приближенное значение  $U(x)$ , то, как правило, возникнет ситуация, когда решение этого уравнения не существует.

Забегая вперед, отметим, что в настоящее время разработаны методы решения задач, основанных на уравнениях типа (9.2), для случаев, когда решение в классическом понимании отсутствует (за счет видоизменения понятия решения). Поэтому решение всегда может быть получено, но для его правильной интерпретации проблема существования решения исходного уравнения должна быть понята.

Аналогичные замечания можно сделать по поводу единственности решения. Неединственность решения возникает всегда, когда спектрометр имеет конечное число выходов. Причина этого ясна: отображение бесконечного пространства спектров на конечномерное пространство не является взаимно однозначным. Выбор нужного решения среди множества возможных может быть осуществлен с привлечением дополнительных (физических) соображений.

Вопрос о существовании и единственности решения уравнения (9.2) тесно связан со свойствами собственных значений и собственных функций ядра этого уравнения. Напомним, что собственной функцией ядра  $G(x, E)$  называют функцию  $\varphi(E)$ , не равную тождественно нулю и удов-



летворяющую уравнению

$$\int_0^{\infty} G(x, E) \varphi(E) dE = \lambda \varphi(E), \quad (9.6)$$

где  $\lambda$  называется собственным значением, соответствующим собственной функции  $\varphi(E)$ . Множество значений  $\lambda$  может быть как дискретным  $\{\lambda_i\}$ , так и непрерывным  $\{\lambda(\xi)\}$ .

Рассмотрим вначале случай симметричного ядра, когда  $G(x, E) = G(E, x)^*$ . Хорошо известно, что собственные функции такого ядра ортогональны друг к другу\*\*, а собственные значения — действительны. Если множество собственных значений дискретно, то ядро  $G(x, E)$  может быть представлено в виде

$$G(x, E) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \varphi_i(x) \varphi_i^*(E), \quad (9.7)$$

где  $\varphi_i^*(E)$  — функция, комплексно сопряженная с  $\varphi_i(E)$ \*\*\*.

Для непрерывного множества собственных значений аналогично (9.7)

$$G(x, E) = \int_{\xi} \lambda(\xi) \varphi_{\xi}(x) \varphi_{\xi}^*(E) d\xi. \quad (9.8)$$

В случае дискретного  $\lambda$  функция  $U(x)$  в уравнении (9.4) может быть представлена в виде ряда

$$U(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \varphi_i(x), \quad (9.9)$$

где  $\alpha_i$  — последовательность комплексных чисел.

Будем искать решение уравнения (9.2) в виде

$$\Phi(E) = \sum_{i=1}^{\infty} \beta_i \varphi_i(E). \quad (9.10)$$

\* Строго говоря, речь идет о ядре самосопряженного оператора, т.е.  $G(x, E) = G^*(E, x)$  [знак (\*) означает комплексное сопряжение]. В нашем случае имеются в виду действительные функции  $G(x, E)$ . Функции  $\varphi(x)$  считают комплексными.

\*\* Это означает, что в дискретном случае  $\int \varphi_i(x) \varphi_j(x) dx = \begin{cases} 1, & i = j; \\ 0, & i \neq j, \end{cases}$  а в непрерывном случае  $\int \varphi_{\xi}(x) \varphi_{\xi'}(x) dx = \delta(\xi - \xi')$ .

\*\*\* Учитывая прикладной характер данного учебного пособия, здесь и далее не рассматриваем условия сходимости рядов, интегрируемости и т.д. Предполагается, что все необходимые условия для этого выполнены (на практике это всегда соблюдается).

Подставляя соотношения (9.7), (9.9) и (9.10) в уравнение (9.2) и учитывая ортогональность функций  $\varphi_i(x)$ , получаем формальную систему уравнений для определения  $\beta_i$ :

$$\alpha_i = \lambda_i \beta_i, \quad i = 1 \dots \quad (9.11)$$

В зависимости от значений  $\alpha_i$  и  $\lambda_i$  возникает три возможных ситуации.

1. Все  $\lambda_i \neq 0$ . Тогда  $\beta_i = \alpha_i/\lambda_i$  и решение уравнения (9.2) существует и единственно:

$$\Phi(E) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\alpha_i}{\lambda_i} \varphi_i(E) \quad (9.12)$$

(при условии, что ряд справа сходится).

2. Некоторые  $\lambda_i = 0$ , а соответствующие  $\alpha_i \neq 0$ . В этом случае решения нет.

3. Некоторые  $\lambda_i = 0$  и соответствующие им  $\alpha_i = 0$ . В этом случае  $\beta_i$  может быть взято произвольным, и решение не единственно.

Аналогичные выводы легко получить и для непрерывного набора собственных значений  $\lambda(\xi)$ . В выражениях (9.9), (9.10) и (9.12) все суммы должны быть заменены интегралами аналогично (9.8).

Рассмотрим теперь общий случай несимметричного ядра  $G(x, E)$ . Для отыскания решения можно ввести два вспомогательных симметричных ядра

$$\left. \begin{aligned} S_1(x, y) &= \int_0^{\infty} G(E, x) G(E, y) dE; \\ S_2(x, y) &= \int_0^{\infty} G(x, E) G(y, E) dE. \end{aligned} \right\} \quad (9.13)$$

Они имеют одни и те же множества неотрицательных собственных значений  $\mu_i^2$  (рассматривается дискретный случай). Если  $\varphi_i^{(1)}(x)$  и  $\varphi_i^{(2)}(x)$  — соответствующие множества собственных функций, то справедливы следующие соотношения:

$$\left. \begin{aligned} \int_0^{\infty} G(x, E) \varphi_i^{(1)}(E) dE &= \mu_i \varphi_i^{(2)}(x); \\ \int_0^{\infty} G(x, E) \varphi_i^{(2)}(x) dx &= \mu_i \varphi_i^{(1)}(E). \end{aligned} \right\} \quad (9.14)$$

С помощью этих соотношений функция  $G(x, E)$  представляется в виде

$$G(x, E) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu_i \varphi_i^{(1)*}(E) \varphi_i^{(2)}(x). \quad (9.15)$$



Далее разложим  $\bar{U}(x)$  в уравнении (9.2) в ряд по  $\varphi_i^{(2)}(x)$ :

$$\bar{U}(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \varphi_i^{(2)}(x), \quad (9.16)$$

а решение будем искать в виде разложения по  $\varphi_j^{(1)}(E)$ :

$$\Phi(E) = \sum_{j=1}^{\infty} \beta_j \varphi_j^{(1)}(E). \quad (9.17)$$

Подставляя выражение (9.15) и (9.16) в уравнение (9.2), с учетом ортогональности  $\varphi_i^{(2)}(x)$  приходим к уравнениям для определения

$$\alpha_j = \mu_j \beta_j, \quad j = 1 \dots \quad (9.18)$$

Как и в случае симметричного ядра, здесь реализуются три возможности:

1. Все  $\mu_j \neq 0$ , тогда  $\beta_j = \alpha_j / \mu_j$ , и решение имеет вид

$$\Phi(E) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\alpha_j}{\mu_j} \varphi_j^{(1)}(E) \quad (9.19)$$

(если ряд справа сходится).

2. Для некоторых  $j$   $\mu_j = 0$  и  $\alpha_j \neq 0$ , решение не существует.

3. Для некоторых  $j$   $\mu_j = 0$ ,  $\alpha_j = 0$  существует бесконечно много решений.

Для непрерывного множества собственных значений рассмотрение и выводы аналогичны.

Для случая, когда ядро уравнения (9.2) имеет вид  $G(x, E) = G(x-E)$ , т.е. зависит от разности аргументов, решение может быть найдено с помощью преобразования Фурье. Применяя это преобразование к уравнению

$$\bar{U}(x) = \int G(x-E) \Phi(E) dE$$

(уравнение типа свертки), получаем уравнение для фурье-образов

$$F_U(\omega) = F_G(\omega) F_{\Phi}(\omega), \quad (9.20)$$

откуда следует формальное решение в виде

$$\Phi(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F_U(\omega)}{F_G(\omega)} e^{i\omega E} d\omega. \quad (9.21)$$

Решение здесь существует, если интеграл сходится. Неединственность решения возникает, если при некоторых  $\omega$  отношение  $F_U(\omega)/F_G(\omega)$  принимает неопределенное значение (типа  $0/0$  или  $\infty/\infty$ ).

Следует сделать важное для последующего изложения замечание. Как уже говорилось, мы не знаем точного значения  $\bar{U}(x)$  и используем вместо него приближенное экспериментальное значение  $U(x)$ , известное с погрешностью [см. уравнение (9.2)]. Если практически осуществлять описанные выше методы, то величины  $\alpha_i$  в уравнениях (9.9) и (9.16) будут содержать некоторую погрешность. Если при этом среди собственных значений  $\lambda_i(\mu_i)$  присутствуют малые величины, то, как следует из выражений (9.12) и (9.19), решение будет иметь большую погрешность, т.е. будет неустойчивым. Именно этот случай наиболее часто встречается на практике. Причина такого поведения собственных значений обсуждается в § 9.5.

### 9.3. Особенности постановки задачи в дискретном случае

Как уже отмечалось, в случае, когда у спектрометра дискретное конечное число выходов (каналов), задача восстановления спектра (9.3) заведомо имеет бесконечно много решений. Большинство из них не согласуется с физическим содержанием исследуемой задачи. Если учесть физический смысл предлагаемого решения, то можно заметно сузить класс возможных решений и искать его в виде линейной комбинации заданных функций до количества, равного числу каналов  $n$ :

$$\Phi(E) = \sum_{j=1}^n \beta_j \psi_j(E). \quad (9.22)$$

Подставляя это выражение в уравнение (9.3), получаем

$$U_i = \int_0^{\infty} G_i(E) \left[ \sum_{j=1}^n \beta_j \psi_j(E) \right] dE = \sum_{j=1}^n G_{ij} \beta_j, \quad (9.23)$$

где

$$G_{ij} = \int G_i(E) \psi_j(E) dE. \quad (9.24)$$

Решая систему уравнений (9.23) относительно  $\beta_j$ , можно отыскать спектр. Если, в частности, функции  $\psi_j(E)$  выбрать в виде

$$\psi_j(E) = \begin{cases} 1, & E_j < E < E_{j+1}; \\ 0 & \text{вне этого интервала} \end{cases} \quad (9.25)$$

[здесь  $E_j$  ( $j = 1, \dots, n+1$ ) — некоторый набор точек в области, где решение предполагается отличным от нуля], то это означает замену интеграла в выражении (9.3) квадратурой по формуле прямоугольников.

Особый интерес представляет случай, когда набор  $\psi_j(E)$  есть взаимно ортогональная система функций, являющихся линейными комбинациями



нациями функций  $G_i(E)$ , т.е.

$$\psi_j(E) = \sum_{i=1}^n \gamma_{ji} G_i(E); \quad (9.26)$$

$$\int \psi_j(E) \psi_k(E) dE = \delta_{jk} \quad (9.27)$$

( $\delta_{jk}$  — символ Кронекера). Подставляя выражение (9.26) в (9.22) и далее (9.22) в уравнение (9.3) с учетом (9.27), можно убедиться, что

$$\beta_j = \sum_{i=1}^n \gamma_{ji} U_i, \quad (9.28)$$

т.е. здесь практически отпадает необходимость решать систему уравнений.

В уравнении (9.22) число слагаемых можно взять равным  $k$ , меньшим, чем  $n$ . В этом случае коэффициенты  $\beta_j$  можно находить с помощью процедуры наименьших квадратов, т.е. минимизируя форму

$$S(\beta_1, \dots, \beta_k) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2} \left( U_i - \sum_{j=1}^k G_{ij} \beta_j \right)^2, \quad (9.29)$$

где  $\sigma_i$  — погрешность измерения величины  $U_i$ .

Рассмотренная постановка задачи для дискретного случая обладает тем недостатком, что выбор функций  $\psi_j(E)$  несколько неопределен. Ситуации, когда они могут быть выбраны однозначно, достаточно редки. В остальных случаях произвол в их выборе приводит к появлению систематической ошибки в решении. Частично преодолеть эту трудность можно изменением постановки задачи. Прежде всего отметим, что задача восстановления спектра, как правило, не возникает, если все спектральные характеристики  $G_i(E)$  отличны от нуля в достаточной узкой области  $\Delta_i$  и приближаются по своему виду к  $\delta$ -функциям. Если сделать естественное предположение, что в пределах отрезка  $\Delta_i$  спектр меняется слабо, то

$$U_i = \int_{\Delta_i} G_i(E) \Phi(E) dE \approx \Phi(\bar{E}_i) \int_{\Delta_i} G_i(E) dE. \quad (9.30)$$

Нормировку для  $G_i(E)$  можно выбрать так, чтобы  $\int G_i(E) dE = 1$ , и тогда

$$\Phi(\bar{E}_i) \approx U_i. \quad (9.31)$$

Таким образом, в данном случае спектр определяется в конечном числе точек без процедуры восстановления, а в остальных точках он мо-

жет быть найден путем интерполяции. Отсюда видно, что задачу о восстановлении спектра можно заменить задачей о восстановлении показаний некоторого гипотетического спектрометра, спектральные характеристики которого, по мнению экспериментатора, являются "идеальными". Это означает, что он может судить о спектре по показаниям такого "идеального" спектрометра, не прибегая к восстановлению спектра. Выбор идеальных характеристик определяется характером физической задачи.

Задача восстановления показаний идеального спектрометра по показаниям реального спектрометра с произвольными спектральными характеристиками имеет, как правило, бесконечно много решений по причине, обсуждавшейся ранее, а именно вследствие различия размерности множества показаний спектрометра и множества спектров. Возможны такие вариации спектра излучения, которые, сохраняя неизменными показания реального спектрометра, тем не менее вызывают вариации показаний идеального спектрометра. Если мы сможем найти границы этих вариаций, то тем самым мы найдем границы вариаций спектра в конечном числе точек.

Как итог сказанного возникает следующая постановка задачи.

Пусть имеется  $n$ -канальный спектрометр, причем  $i$ -й канал имеет спектральную характеристику  $G_i(E)$ , и в результате измерений получены показания  $U_i$  в каждом из  $n$  каналов, связанные с измеряемым спектром соотношением (9.3):

$$U_i = \int G_i(E) \Phi(E) dE. \quad (9.32)$$

Далее, пусть нас интересуют показания  $V_j$  идеального спектрометра с принятыми характеристиками  $W_j(E)$ . Тогда

$$V_j = \int W_j(E) \Phi(E) dE, \quad j = 1, \dots, k. \quad (9.33)$$

Задача заключается в том, чтобы найти верхнюю и нижнюю границы показаний  $V_j$  при произвольных вариациях  $\Phi(E)$ , сохраняющих неизменными все величины  $U_i$ :

$$\left. \begin{aligned} V_j^{\max} &= \max_{\Phi} \int W_j(E) \Phi(E) dE; \\ V_j^{\min} &= \min_{\Phi} \int W_j(E) \Phi(E) dE; \end{aligned} \right\} \quad (9.34)$$

$$\int G_i(E) \Phi(E) dE = U_i; \quad \Phi(E) \geq 0.$$

Возможна иная, так называемая двойственная постановка той же самой задачи.

Допустим, что мы интересуемся вариациями показаний  $j$ -го канала идеального спектрометра, имеющего спектральную характеристику



$W_j(E)$ . Возьмем функции  $G_i$  и подберем коэффициенты  $a_{ji}$  таким образом, чтобы выполнялось неравенство

$$W_j(E) \leq \sum_{i=1}^n a_{ji} G_i(E). \quad (9.35)$$

Умножим это неравенство на произвольный спектр  $\Phi(E)$  и проинтегрируем по  $E$ . В силу неотрицательности  $\Phi(E)$  будет справедливо неравенство

$$\int W_j(E) \Phi(E) dE \leq \sum_{i=1}^n a_{ji} \int G_i(E) \Phi(E) dE \quad (9.36)$$

или

$$V_j \leq \sum_{i=1}^n a_{ji} U_i. \quad (9.37)$$

Наша цель — найти такие  $a_{ji}$ , чтобы правая часть неравенства (9.37) была как можно меньше, т.е. чтобы она была точной верхней границей для  $V_j$ . Таким образом, возникает следующая постановка задачи (двойственная задача линейного программирования): варьируя  $a_{ji}$  при соблюдении неравенства (9.35), найти

$$\min \sum_i a_{ji} U_i. \quad (9.38)$$

Полученное таким способом минимальное значение  $\sum a_{ji} U_i$  будет совпадать с  $V_{\max}$ , найденным из (9.34)\*.

Аналогично ставится задача для отыскания нижней границы. Задача в приведенной постановке относится к классу задач линейного программирования. В ней не учитывается наличие погрешности  $\sigma_i$  в определении величин  $U_i$ . Левая и правая части равенства (9.3) могут отличаться друг от друга на эту погрешность. В соответствии с этим мы должны ограничение типа равенства заменить на ограничение типа неравенства. В результате возникает следующая постановка задачи. Требуется найти,

$$\left. \begin{aligned} V_j^{\max} &= \max_{\Phi} \int W_j(E) \Phi(E) dE; \\ V_j^{\min} &= \min_{\Phi} \int W_j(E) \Phi(E) dE \end{aligned} \right\} \quad (9.39)$$

\* Это утверждение составляет содержание основной теоремы теории линейного программирования.

при произвольном варьировании  $\Phi(E) \geq 0$  и

$$\sum_{i=1}^N \left( \frac{U_i - \int G_i(E) \Phi(E) dE}{\sigma_i} \right)^2 \leq C. \quad (9.40)$$

Это неравенство описывает эллипсоид рассеяния вектора измеряемых величин  $U_i$ , считающихся независимыми, при этом предполагается, что выражение  $\int G_i(E) \Phi(E) dE$  является математическим ожиданием для величины  $U_i$ . Константу  $C$  находят из условия, чтобы вероятность обнаружить точку с координатами  $(U_1, \dots, U_n)$  внутри эллипсоида рассеяния равнялась  $1 - \epsilon$ , где  $\epsilon$  — малое число, задаваемое исследователем (доверительный уровень). Связь между  $\epsilon$  и  $C$  задается стандартным распределением  $\chi^2$  с  $n$  степенями свободы.

В заключение отметим, что интервал  $|V_j^{\max} - V_j^{\min}|$  зависит от выбора  $W_j(E)$ . Если  $W_j(E)$  является линейной комбинацией  $G_i(E)$ , то  $V_j^{\max} = V_j^{\min}$ . Это, разумеется, не означает точного решения задачи, так как сохранился произвол в выборе  $W_j(E)$ .

#### 9.4. Плохо обусловленные системы уравнений

Любой практический способ решения уравнений (9.2) и (9.3) связан с дискретизацией, необходимой для применения численных методов. Она осуществляется путем использования одной из формул механических квадратур (прямоугольников, трапеций, Симпсона и т.п.) или представления предполагаемого решения в виде линейной комбинации набора заданных функций. В результате имеем дело с системой линейных алгебраических уравнений вида

$$\sum_{i=1}^n G_{ij} \Phi_j = U_i. \quad (9.41)$$

Ранее уже упоминалось о неустойчивости решения уравнений (9.2) и (9.3). Эта неустойчивость присутствует и при решении системы (9.41). Степень неустойчивости полезно знать заранее, так как она характеризует возможности спектрометра по восстановлению спектров.

Вспользуемся матричной записью уравнений (9.41), введя векторы  $\mathbf{U}$  и  $\Phi$  с компонентами  $(U_1 \dots U_n)$  и  $(\Phi_1 \dots \Phi_n)$  и матрицу  $\mathbf{G}$  с элементами  $G_{ij}$ . Пусть точному значению  $\mathbf{U}_0$  соответствует решение  $\Phi_0$  (т.е.  $\mathbf{G}\Phi_0 = \mathbf{U}_0$ ), а приближенному значению  $\mathbf{U} = \mathbf{U}_0 + \Delta\mathbf{U}$  — решение  $\Phi = \Phi_0 + \Delta\Phi$ . Очевидно,  $\Delta\mathbf{U} = \mathbf{G}\Delta\Phi$ .

Мерой устойчивости решения может служить величина

$$\mu = \frac{\|\Delta\Phi\|}{\|\Phi\|} \bigg/ \frac{\|\Delta\mathbf{U}\|}{\|\mathbf{U}\|}, \quad (9.42)$$



где  $\|\cdot\|$  – некоторым образом выбранная норма вектора. Это отношение указывает, во сколько раз "относительная погрешность" решения превышает "относительную погрешность" исходных данных.

Свойства спектрометра, представленные матрицей  $G$ , следует охарактеризовать способом, не зависящим от свойств вектора  $U$ . Для этого в качестве меры устойчивости следует взять величину

$$\nu = \max_{\Delta Y, Y} \mu. \quad (9.43)$$

Она называется **числом обусловленности матрицы  $G$** . Если  $\nu \gg 1$ , то говорят, что система **плохо обусловлена**. Если  $\nu \approx 1$ , то система **хорошо обусловлена**. Отметим, что всегда  $\nu \geq 1$ .

В курсе линейной алгебры показывается, что

$$\nu = \|G\| \cdot \|G^{-1}\|, \quad (9.44)$$

где  $\|\cdot\|$  – норма, согласованная с определенной ранее нормой вектора\*. Можно показать, что если норма определена в виде  $\|x\| =$

$$= \sum_{i=1}^n x_i^2, \text{ то}$$

$$\nu = \sqrt{\lambda_{\max} / \lambda_{\min}}, \quad (9.45)$$

где  $\lambda_{\max}$  и  $\lambda_{\min}$  – соответственно максимальное и минимальное собственные значения матрицы  $G^T G$ .

### 9.5. Некорректность задачи восстановления спектров

В § 9.2 уже отмечалось, что если среди собственных значений ядра  $G(x, E)$  присутствуют малые величины, то решения уравнения (9.2) будут неустойчивыми по отношению к малым изменениям функции  $U(x)$ . Можно показать, что если  $G(x, E)$  является непрерывной и интегрируемой функцией, то совокупность собственных значений представляет собой последовательность, сходящуюся к нулю. Это означает, что среди собственных значений есть сколь угодно малые значения, и при конечной погрешности в определении  $U(x)$  решение  $\Phi(E)$  будет иметь сколь угодно большую погрешность. Именно таким свойством обладают ядра, встречающиеся в задачах спектрометрии.

Подобного рода задачи называют **некорректно поставленными**.

Рассмотрим проблему некорректности подробнее. Функции  $G(x, E)$ , встречающиеся в задачах спектрометрии, обладают заглаживающим действием. Это обстоятельство иллюстрируют рис. 9.1, на котором

\* Напомним, что  $\|G\| = \max_x \|Gx\|$  при  $\|x\| = 1$ .

Рис. 9.1. Различие истинных спектров при незначительно различающихся аппаратурных спектрах

показаны истинные спектры  $\Phi_1(E)$  и  $\Phi_2(E)$  и соответствующие аппаратурные спектры  $U_1(x)$  и  $U_2(x)$ . В качестве функции отклика взята гауссова кривая  $G(x, E) \sim \exp[-(x-E)^2/2\sigma^2]$ . Обращают на себя внимание две особенности.

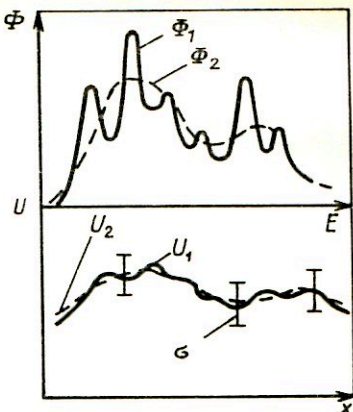
1. Спектру  $\Phi_1(E)$ , имеющему достаточно тонкую структуру, соответствует аппаратурный спектр  $U_1(x)$ , в котором эта структура проявляется очень слабо, что является следствием заглаживающего действия ядра.

2. Если разность  $|U_1(x) - U_2(x)|$  меньше погрешности их измерения, то у нас нет возможности различить спектры  $\Phi_1(E)$  и  $\Phi_2(E)$ , хотя фактически они различаются сильно.

Таким образом, при заглаживающем действии ядра аппаратурный спектр либо не содержит информации о детальной структуре решения, либо она потонула в "шумах", обусловленных погрешностью измерений. В результате мы имеем дело с недоопределенной задачей, т.е. с задачей, в которой исходные данные недостаточны для решения. Именно с этим фактом связано происхождение термина "некорректность постановки задачи". Тот же вывод можно сделать, анализируя уравнения (9.3).

В силу этой неопределенности обратные задачи (задачи восстановления) многие годы считались "незаконными". Развитые в последние годы методы решения таких задач основаны на принципиально новом подходе, заключающемся в том, что задача доопределяется исходя из физических соображений. На основе теории, прошлого опыта или просто здравого смысла предполагаемому решению априори приписывают некоторые свойства, которые представляют в виде количественных соотношений. Совокупность этих соотношений и исходное уравнение совместно образуют полностью определенную задачу, и можно рассчитывать на ее устойчивость. Ясно, что успех в решении целиком обусловлен тем, насколько истинный спектр обладает свойствами, которые приписываются ему заранее. Опыт показывает, что введения свойств довольно общего характера (гладкости, неотрицательности, близости к некоторой заданной функции), как правило, уже достаточно, чтобы сделать задачу корректной (устойчивой). Излагаемые ниже методы построены на таком подходе.

Простейший способ доопределения задачи сводится к тому, что априори предполагается, что решение  $\Phi(E)$  принадлежит к классу функ-





ций, описываемому конечным числом параметров, т.е.

$$\Phi(E) = f(E, \alpha_1, \dots, \alpha_k), \quad (9.46)$$

где  $f$  — функция заданного вида, и численные значения параметров неизвестны. Эти параметры могут быть найдены методом наименьших квадратов, т.е. из условия минимума выражения

$$S(\alpha_1, \dots, \alpha_k) = \int \left( \frac{U(x) - \int G(x, E) f(E, \alpha_1 \dots \alpha_k) dE}{\sigma(x)} \right)^2 dx, \quad (9.47)$$

где  $\sigma(x)$  — погрешность определения  $U(x)$ . Для дискретного случая аналогичное выражение имеет вид

$$S(\alpha_1, \dots, \alpha_k) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2} (U_i - \int G_i(E) f(E, \alpha_1 \dots \alpha_k) dE)^2. \quad (9.48)$$

Если число параметров невелико, то задача минимизации функции  $S(\alpha_1, \dots, \alpha_k)$ , как правило, устойчива. Следует, однако, отметить, что требование (9.46) является весьма сильным, и в большинстве случаев не удастся простыми способами определить конечномерный класс, которому принадлежит решение.

## 9.6. Метод регуляризации А.Н. Тихонова

Метод регуляризации был предложен советским математиком академиком А.Н. Тихоновым и детально разработан руководимый им математической школой [27]. Ниже излагается этот метод применительно к решению уравнения Фредгольма первого рода типа (9.2):

$$U(x) = \int G(x, E) \Phi(E) dE. \quad (9.49)$$

Прежде всего отметим, что в случае, когда  $U(x)$  известно с погрешностью  $\sigma(x)$ , любая функция  $\tilde{\Phi}(E)$ , такая, что

$$|U(x) - \int G(x, E) \tilde{\Phi}(E) dE| < \sigma(x), \quad (9.50)$$

может быть принята в качестве решения. Условие (9.50) влечет за собой условие

$$\int |U(x) - \int G(x, E) \tilde{\Phi}(E) dE|^2 dx < \delta^2 = \int \sigma^2(x) dx, \quad (9.51)$$

которое мы примем в качестве меры отличия функций  $U(x)$  и  $\tilde{U}(x) = \int G(x, E) \tilde{\Phi}(E) dE$ . Левая часть неравенства (9.51) называется не-

вязкой. Естественно, и в такой постановке задача решения уравнения (9.49) остается некорректной.

Как указывалось в § 9.5, задача должна быть доопределена. В методе регуляризации такое доопределение осуществляется путем наложения ограничений на аналитические свойства решения  $\Phi(E)$ . Из соображений физического смысла наиболее естественными являются требования гладкости и близости решения к заданной функции  $\Phi_0(E)$ .

Интуитивному представлению о гладкости соответствует плавно меняющаяся непрерывная функция. Такое ее поведение имеет место в случае, когда модуль производной этой функции (или ее квадрат) имеет небольшое значение, поэтому степень гладкости может быть выражена функционалом

$$\Omega_1(\Phi) = \int q_1(E) [\Phi'(E)]^2 dE. \quad (9.52)$$

Для гладких функций он ограничен. Функция  $q_1(E) \geq 0$  обеспечивает разную степень гладкости при различных значениях аргумента  $E$  и выбирается из физических соображений.

Доопределение некорректной задачи на основе требования гладкости сводится к тому, что среди всех функций, удовлетворяющих неравенству (9.51), в качестве решения уравнения (9.49) с функцией  $U(x)$ , известной приближенно, принимается наиболее гладкая функция, т.е. функция, реализующая минимум функционала (9.52). Можно доказать, что этот минимум реализуется на границе множества функций  $\Phi(E)$ , определяемого неравенством (9.51), которое при этом обращается в равенство.

Таким образом, приходим к следующей постановке задачи.

Требуется найти функцию  $\Phi(E)$ , при которой функционал (9.52) принимает наименьшее значение при условии

$$\int |U(x) - \int G(x, E) \Phi(E) dE|^2 dx = \delta^2. \quad (9.53)$$

Эта задача на отыскание условного экстремума функционала может быть решена, как известно, методом неопределенных множителей Лагранжа, который сводится к минимизации функционала

$$M^\alpha(\Phi) = \int [U(x) - \int G(x, E) \Phi(E) dE]^2 dx + \alpha \int q_1(E) [\Phi'(E)]^2 dE, \quad (9.54)$$

где  $\alpha$  — неопределенный множитель Лагранжа, определяемый из условия (9.53), куда в качестве  $\Phi(E)$  подставляется  $\Phi_\alpha(E)$ , реализующая минимум функционала (9.54). Процедура минимизации рассмотрена ниже.

Аналогично можно доопределить задачу на основании требования о близости решения к заданной функции. Приняв в качестве меры



близости функционал

$$\Omega_0(\Phi) = \int q_0(E) [\Phi(E) - \Phi_0(E)]^2 dE \quad (9.55)$$

$[q_0(E) \geq 0]$ , приходим к следующей постановке задачи.

Требуется найти функцию  $\Phi(E)$ , реализующую минимум функционала  $\Omega_0(\Phi)$  при условии (9.53). Без ограничения общности (путем соответствующих замен) в уравнении (9.55) можно положить  $\Phi_0(E) = 0$ .

Возможно учесть оба условия одновременно, выбрав функционал в виде

$$\Omega(\Phi) = \int [q_0(E) \Phi^2(E) + q_1(E) \Phi'(E)^2] dE. \quad (9.56)$$

При этом по аналогии с (9.54) задача отыскания решения  $\Phi(E)$  сводится к задаче отыскания минимума функционала

$$M^\alpha(\Phi) = \int [U(x) - \int G(x, E) \Phi(E) dE]^2 dx + \alpha \int \{ q_0(E) \Phi^2(E) + q_1(E) [\Phi'(E)]^2 \} dE. \quad (9.57)$$

**Замечание 1.** К приведенной выше постановке можно прийти другим путем. Обратим внимание на то, что задача отыскания решения уравнения (9.49) сводится к отысканию минимума функционала \*

$$J(\Phi) = \int [U(x) - \int G(x, E) \Phi(E) dE]^2 dx. \quad (9.58)$$

Доопределяя задачу, будем искать его минимум на классе гладких функций, удовлетворяющих условию

$$\int q_1(E) [\Phi'(E)]^2 dE \leq C_1, \quad (9.59)$$

и функций, близких к заданной ( $\Phi_0(E) = 0$ ), т.е.

$$\int q_0(E) \Phi^2(E) dE \leq C_0. \quad (9.60)$$

Эти ограничения объединим в одно:

$$\int \{ q_0(E) \Phi^2(E) + q_1(E) [\Phi'(E)]^2 \} dE \leq C. \quad (9.61)$$

Можно доказать, что минимум функционала (9.58) при ограничении (9.61) достигается на границе множества, определяемого неравенством (9.61), т.е. когда имеет место равенство. В результате приходим к задаче поиска экстремума функционала (9.58) при условии (типа равенства) (9.58), что приводит к задаче (9.57).

---

\* Функция  $\Phi(E)$ , являющаяся решением уравнения (9.49), очевидно, доставляет минимум функционалу (9.58). Если же уравнение (9.49) не имеет решения в точном смысле вследствие наличия погрешностей в  $U(x)$ , то  $\Phi(E)$ , минимизирующая  $J(\Phi)$ , является наилучшим среднеквадратическим приближением к решению уравнения (9.49) при точно заданной  $U(x)$  (квазирешение).

**Замечание 2.** Наиболее общая постановка задачи заключается в том, что априори (из соображений физического смысла) назначается вид функционала  $\Omega(\Phi)$ , на который накладывается ограничение

$$\Omega(\Phi) < C, \quad (9.62)$$

и решается задача минимизации функционала (9.58) при ограничении, задаваемом неравенством (9.62). С математической точки зрения получающееся решение будет устойчивым в том случае, если класс функций  $\Phi(E)$ , удовлетворяющих неравенству (9.62), будет представлять собой компактное множество. Наиболее употребительными функционалами  $\Omega(\Phi)$  являются функционалы вида

$$\Omega(\Phi) = \int \left\{ \sum_{k=0}^n q_k(E) [\Phi^{(k)}(E)]^2 \right\} dE. \quad (9.63)$$

Такие функционалы называют **стабилизаторами**.

В задачах, где решение  $\Phi(E)$  уравнения (9.49) толкуется как плотность вероятности, т.е.  $\Phi(E) \geq 0$  и  $\int_0^{\infty} \Phi(E) dE = 1$ , в качестве стабилизатора  $\Omega$  используют функционал энтропии

$$\Omega(\Phi) = \int_0^{\infty} \Phi(E) \ln \Phi(E) dE. \quad (9.64)$$

Отыскивается  $\Phi(E)$ , реализующее максимум функционала (9.64) при условии (9.53). Этот метод, называемый методом максимальной энтропии, использует в качестве априорных сведений представление о наибольшей "размазанности" решения, что близко к идее гладкости.

**Замечание 3.** Левая часть неравенства (9.53) и функционал (9.58) в соответствии с особенностями задачи могут быть обобщены в следующем виде:

$$J(\Phi) = \int W(x) [U(x) - \int G(x, E) \Phi(E) dE]^2 dx, \quad (9.65)$$

где  $W(x) \geq 0$ , соответственно

$$\delta^2 = \int W(x) \sigma^2(x) dx. \quad (9.66)$$

Функция  $W(x) = \sigma^{-2}(x)$  является в некотором смысле наилучшей, так как она приводит выражение в скобках в подынтегральном выражении к единичной дисперсии.

**Замечание 4.** Физическое условие неотрицательности спектра  $\Phi(E)$  может быть учтено введением замены  $\Phi(E) = \exp[\psi(E)]$  или  $\Phi(E) = \psi^2(E)$ . Однако это приводит к существенному усложнению алгоритма решения. Аналогично можно учесть при необходимости монотон-



ный характер решения заменой типа  $\Phi(E) = \int_E^{\infty} \exp[\psi(t)] dt$ .

Обратимся к процедуре минимизации функционала (9.57). Необходимое условие минимума — равенство нуля первой вариации

$$\delta M^{\alpha}(\Phi) = 0, \quad (9.67)$$

которую легче всего вычислить следующим образом. Функции  $\Phi(E)$  придается приращение  $\beta\varphi(E)$ , где  $\beta$  мало и  $\varphi(E)$  произвольно:

$$\Phi_1(E) = \Phi(E) + \beta\varphi(E). \quad (9.68)$$

Подставляя  $\Phi_1(E)$  в функционал (9.57), получаем функцию  $f(\beta)$  от аргумента  $\beta$ . Равенство

$$\left. \frac{df}{d\beta} \right|_{\beta=0} = 0 \quad (9.69)$$

обеспечивает требуемое условие минимума. Уравнение (9.69) обычно называется уравнением Эйлера—Лагранжа. После выполнения выкладки по указанному правилу для функционала (9.57) получаем это уравнение в виде

$$\int B(s, \xi) \Phi(\xi) d\xi - \alpha \left\{ \frac{d}{ds} \left[ q_1(s) \frac{d\Phi(s)}{ds} \right] - q_0(s) \Phi(s) \right\} = b(s), \quad (9.70)$$

где

$$\left. \begin{aligned} B(s, \xi) &= \int_a^b G(x, s) G(x, \xi) dx; \\ b(s) &= \int_a^b G(x, s) U(x) dx. \end{aligned} \right\} \quad (9.71)$$

Для получения единственного решения этого уравнения нужны граничные условия, которые задаются априори, т.е. из физических соображений. На левой  $a$  и правой  $b$  границах должно быть задано значение решения. В противном случае его производная на границах приравняется к нулю.

Уравнение (9.70) обычно решают приближенно численным методом. С этой целью интегралы в выражениях (9.70), (9.71) меняются на суммы с помощью одной из формул механических квадратур (например, формулы Симпсона), а производные — на конечные разности. Действуя таким образом, приходим к системе линейных алгебраических урав-

нений относительно  $\Phi_j = \Phi(s_j)$ :

$$\sum_{j=1}^n \sigma_j B_{ij} \Phi_j h - \frac{\alpha}{h^2} [q_{1,i-1} \Phi_{i-1} - q_{1,i} \Phi_{i+1} - (q_{1,i} + q_{1,i-1}) \Phi_i - h^2 q_{0,i} \Phi_i] = b_i, \quad (9.72)$$

где  $\sigma_j$  — коэффициенты квадратурной формулы

$$B_{ij} = \sum_{l=1}^n \sigma_l G_{li} G_{lj} h; \quad b_i = \sum_{l=1}^n \sigma_l G_{li} U_l h;$$

$$U_l = U(x_l); \quad q_{1,i} = q_1(s_i); \quad q_{0,i} = q_0(s_i).$$

Эта система дополняется конечно-разностным аналогом граничных условий  $\Phi_0 = C_1$ ;  $\Phi_{n+1} = C_2$  или  $\Phi_1 = \Phi_0$ ;  $\Phi_n = \Phi_{n+1}$  (аналог равенства нулю производной на границе).

Остановимся на проблеме выбора параметра  $\alpha$ . Формально такой выбор осуществляется на основании величины  $\delta^2$ , однако практически в задании самой величины существует неопределенность, связанная с неоднозначной трактовкой  $\sigma^2(x)$ \*. Поэтому, кроме изложенного выше способа нахождения  $\alpha$  через  $\delta^2$ , возможны и другие способы. Наиболее надежным является способ моделирования. В нем выбирают функцию  $\Phi(E)$ , вид которой близок к предполагаемому решению. Далее из уравнения (9.49) находят соответствующую ей функцию  $U(x)$  и осуществляют переход к дискретным переменным  $U_i$  и  $\Phi_j$ ; переменным  $U_i$  с помощью генератора случайных чисел придают случайные добавки, имитирующие экспериментальные погрешности. Для получения таким способом "экспериментальных" данных решают задачу отыскания  $\Phi_j$  описанным выше способом, и ответ сравнивают с заданной функцией  $\Phi(E)$ . Параметр  $\alpha$  выбирают из условия наилучшего совпадения этих двух функций и затем используют для решения уравнения с реальными данными.

Если мы имеем дело с уравнением (9.49) типа свертки, т.е.

$$U(x) = \int G(x-E) \Phi(E) dE,$$

то процедура решения существенно упрощается. В этом случае если в уравнении (9.70) положить  $q_0 = 0$  и  $q_1(s) = 1$  и перейти к фурье-образам, то получим уравнение

$$F_G^*(\omega) F_G(\omega) F_\Phi(\omega) + \alpha \omega^2 F_\Phi(\omega) = F_G^*(\omega) F_U(\omega), \quad (9.73)$$

\*  $\sigma(x) = k \sigma_0(x)$ , где  $\sigma_0(x)$  — среднеквадратическое отклонение,  $k$  — произвольно назначаемый коэффициент,  $k \sim 1 \div 3$ .



где  $F(\omega)$  с индексом  $G, \Phi, U$  означает фурье-образ соответствующей функции;  $F^*(\omega)$  – комплексно-сопряженная функция. Отсюда

$$\left. \begin{aligned} F_{\Phi}(\omega) &= \frac{F_G^*(\omega)}{F_G^*(\omega) F_G(\omega) + \alpha \omega^2} F_U(\omega); \\ \Phi(E) &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_{\Phi}(\omega) e^{i\omega E} d\omega = \\ &= \int \frac{F_G^*(\omega) F_U(\omega)}{|F_G(\omega)|^2 + \alpha \omega^2} e^{i\omega E} d\omega. \end{aligned} \right\} \quad (9.74)$$

Параметр  $\alpha$  определяется, как и раньше, по невязке. Существуют методы нахождения оптимального  $\alpha$ , которые, по существу совпадают с методами оптимальной фильтрации.

### 9.7. Метод статистической регуляризации

Метод статистической регуляризации [29] используют для решения уравнения (9.49) в дискретизованной форме:

$$U_i = \sum_{j=1}^n G_{ij} \Phi_j, \quad i = 1, \dots, m, \quad (9.75)$$

где  $U_i = U(x_i)$ ;  $\Phi_j = \Phi(E_j)$ ;  $G_{ij} = G(x_i E_j) \sigma_j \Delta E_j$ ,  $\sigma_j$  – коэффициенты квадратурной формулы. Отметим, что  $m$  необязательно равно  $n$ .

Для сокращения записи далее будем использовать векторную форму записи. С этой целью введем столбцы-векторы  $\mathbf{U} = (U_1, \dots, U_m)^T$  и  $\Phi = (\Phi_1, \dots, \Phi_n)^T$  ( $T$  – знак транспонирования). Обозначим  $\mathbf{G}$  матрицу с элементами  $G_{ij}$ . Скалярное произведение вида  $\sum_i x_i y_i$  обозначим  $\mathbf{X}^T \mathbf{Y}$ .

Уравнение (9.75) в этих обозначениях переписывается в виде

$$\mathbf{U} = \mathbf{G} \Phi. \quad (9.75a)$$

В методе статистической регуляризации вектор  $\Phi$  трактуется как случайный вектор с математическим ожиданием, равным некоторому неизвестному  $\Phi_0$ . Без ограничения общности  $\Phi_0$  можно положить равным нулю. Для этого достаточно преобразовать уравнение (9.75).

Доопределение задачи с целью сделать ее корректной в данном случае осуществляют путем введения априорных ограничений на статистические свойства вектора  $\Phi$ , а именно считают, что он подчиняется **распределению заданной формы**. Наиболее типичным предположением, рассмотрением которого мы ограничимся, является предположение

о нормальном законе распределения вектора  $\Phi$  с заданной ковариационной матрицей  $B$ , т.е. плотность вероятности имеет вид

$$P(\Phi) = \text{const} \exp [-(\Phi^T B^{-1} \Phi)/2]. \quad (9.76)$$

В итоге возникает следующая постановка задачи: требуется найти наиболее вероятное значение вектора  $\Phi$ , удовлетворяющее условию

$$(U - G\Phi)^T W(U - G\Phi) \leq \delta^2, \quad (9.77)$$

где  $W$  — матрица, обратная ковариационной матрице вектора  $U$  (она обычно диагональна). Это условие вполне аналогично условию (9.51). Максимум выражения (9.76) реализуется при условии минимума квадратичной формы  $(\Phi^T B^{-1} \Phi)$ . Можно показать, что при этом неравенство (9.77) достигает границы и обращается в равенство. Для отыскания минимума  $(\Phi^T B^{-1} \Phi)$  при условии (9.77) типа равенства используют метод неопределенных множителей Лагранжа, в соответствии с которым минимизируют квадратичную форму

$$(U - G\Phi)^T W(U - G\Phi) + \alpha \Phi^T B^{-1} \Phi. \quad (9.78)$$

Дифференцируя ее по  $\Phi_i$ , получаем систему линейных алгебраических уравнений для отыскания  $\Phi$ :

$$(G^T W G + \alpha B^{-1}) \Phi = G^T W U, \quad (9.79)$$

откуда

$$\Phi = (G^T W G + \alpha B^{-1})^{-1} G^T W U. \quad (9.80)$$

Параметр  $\alpha$  отыскивают из условия (9.77) (со знаком равенства).

**Замечание.** Как видно, при соответствующем подборе матрицы уравнение (9.79) совпадает с (9.72). Это совпадение не случайно. Наложение ограничения на ковариационную матрицу приводит к согласованному поведению соседних компонент вектора  $\Phi$ , т.е., по существу, эквивалентно требованию гладкости функции  $\Phi(E)$ . Для любой матрицы  $B$  можно подобрать стабилизатор вида (9.63), такой, что решение (9.80) и решение по методу регуляризации совпадают. Таким образом, для нормально распределенных случайных векторов  $\Phi$  метод регуляризации по А.Н. Тихонову и метод статистической регуляризации тождественны друг другу.

Статистический подход позволяет наглядно трактовать тот или иной выбор  $\alpha$ . Так, если  $\Phi$  известно точно и вектор  $U$  распределен по нормальному закону с ковариационной матрицей  $B_U$ , то величина

$$\chi^2 = (U - G\Phi)^T W(U - G\Phi) \quad (W = B_U^{-1}) \quad (9.81)$$

подчиняется стандартному распределению  $\chi^2$  с  $n$  степенями свободы. Тогда со статистической точки зрения ясно, что наилучшим значением  $\alpha$



должно быть значение, соответствующее  $\delta^2$ , равному наиболее вероятному или среднему значению  $\chi^2$ .

Можно обойтись вообще без выбора  $\alpha$  и поступить следующим образом. Найти решение  $\Phi_\alpha(E)$  для всех значений  $\delta^2 = \chi^2$  ( $\alpha = f(\chi^2)$ ), а затем в качестве окончательного решения взять

$$\Phi(E) = \int \Phi_\alpha(E) p_n(\chi^2) d\chi^2, \quad (9.82)$$

где  $p_n(\chi^2)$  — упоминающееся ранее распределение  $\chi^2$  с  $n$  степенями свободы. Такой способ позволяет представить решение в виде линейной комбинации функций разной степени гладкости, что часто бывает более приемлемо с физической точки зрения, нежели решение с фиксированным  $\alpha$ .

Вместо функции  $p_n(\chi^2)$  можно взять некоторую функцию  $p(\alpha)$  из априорных физических соображений, и тогда решение будет иметь вид

$$\Phi(E) = \int p(\alpha) \Phi_\alpha(E) d\alpha. \quad (9.83)$$

### 9.8. Метод регуляризации М.М. Лаврентьева [28]

Этот метод легче всего пояснить на примере дискретизованной системы уравнений

$$U_i = \sum_{j=1}^n G_{ij} \Phi_j. \quad (9.84)$$

Система (9.84) неустойчива (имеет большое число обусловленности), если определитель матрицы  $G$  мал, что в подавляющем большинстве практических случаев имеет место. В свою очередь, на определитель влияют значения диагональных элементов матрицы: чем они больше, тем больше определитель\*. Следовательно, устойчивость системы можно повысить, если искусственно увеличить диагональные элементы, т.е. вместо системы (9.84) решать систему

$$U_i = \alpha \Phi_i + \sum_{j=1}^n G_{ij} \Phi_j. \quad (9.85)$$

Параметр  $\alpha$  находят методом невязки на основе соображений, полностью аналогичных изложенным в § 9.6 [см. (9.51)], т.е. его можно

\* Предполагается, что  $G_{ij} \geq 0$ .

найти из условия

$$\sum_i \left( U_i - \sum_{j=1}^n G_{ij} \Phi_j^\alpha \right)^2 < \sum \sigma_i^2, \quad (9.86)$$

где  $\Phi_j^\alpha$  — решение системы (9.85);  $\sigma_i$  — погрешность величин  $U_i$ . В недискретизованной форме аналогом уравнения (9.85) является интегральное уравнение второго рода

$$\alpha \Phi(x) + \int_0^\infty G(x, E) \Phi(E) dE = U(x). \quad (9.87)$$

Рассмотрим частный случай этого уравнения — уравнение типа свертки

$$\alpha \Phi(x) + \int_0^\infty G(x - E) \Phi(E) dE = U(x). \quad (9.88)$$

Применяя к обеим частям уравнения (9.80) преобразование Фурье, для фурье-образов получим соотношение [ср. с (9.74)]:

$$\alpha F_\Phi(\omega) + F_G(\omega) F_\Phi(\omega) = F_U(\omega),$$

отсюда

$$F_\Phi(\omega) = \frac{F_U(\omega)}{F_G(\omega) + \alpha} \quad (9.89)$$

и

$$\Phi(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F_U(\omega)}{F_G(\omega) + \alpha} e^{i\omega E} d\omega. \quad (9.90)$$

### 9.9. Методы итеративной регуляризации [28]

Существует несколько методов решения корректных задач и, в частности, восстановления спектров, в которых идея доопределения задачи представлена иначе, чем в изложенных выше. Она часто выражена менее отчетливо, но всегда существует. К таким методам относятся методы итеративной регуляризации. Рассмотрим существование этих методов на примере дискретизованного уравнения

$$U_i = \sum_j G_{ij} \Phi_j. \quad (9.91)$$

На основе системы уравнений (9.91) путем тождественных преобразований строится эквивалентная система уравнений, представленная в виде

$$\Phi_i = R_i(U_1, \dots, U_n, \Phi_1, \dots, \Phi_n). \quad (9.92)$$



С помощью этого равенства образуется итерационная процедура

$$\Phi_i^{(m+1)} = R_i (U_1, \dots, U_n, \Phi_1^{(m)}, \dots, \Phi_n^{(m)}). \quad (9.93)$$

Функции  $R_i$  и начальное приближение  $\Phi_i^{(0)}$  подбирают таким образом, чтобы в отсутствие погрешности величин  $U_i$  последовательность  $\Phi_i^{(m)}$  сходилась к точному решению системы (9.91).

Итерационный процесс продолжается до тех пор, пока не выполнится неравенство

$$\sum \frac{1}{\sigma_i^2} \left( U_i - \sum_{j=1}^n G_{ij} \Phi_j^{(m)} \right)^2 \leq \delta^2, \quad (9.94)$$

где  $\sigma_i^2$  — дисперсия измерений  $U_i$ ;  $\delta^2$  — константа, примерно равна  $n$  [ср. с (9.40)].

Доопределение задачи здесь представлено неявно и заключается в том, что итерационный процесс прекращается не естественным путем, т.е. когда, например,  $\Phi_i^{(m+1)} - \Phi_i^{(m)} < \epsilon_i$  для всех  $i$ , а гораздо раньше — при выполнении условия (9.94). Таким образом отыскивается приближение  $\Phi^{(m)}(E)$  (мы перешли к непрерывной форме описания), которое достаточно близко к заданной функции  $\Phi^{(0)}(E)$  и неотличимо от точного решения в смысле равенства (9.94). Если функция  $R_i$  подобрана таким образом, что на каждом шагу итерационного процесса вносится малое возмущение, то, если начальное приближение  $\Phi^{(0)}(E)$  есть гладкая функция, при небольшом числе итераций функция  $\Phi^{(m)}(E)$  сохранит гладкость.

Одним из возможных способов построения итерационного процесса является следующий:

$$\Phi^{(m+1)} = \Phi^{(m)} + \nu [G^T U - G^T G \Phi^{(m)}]. \quad (9.95)$$

Здесь использованы векторные обозначения. Величина  $\nu$  выбирается так, чтобы обеспечить сходимость итерационного процесса. Для этого достаточно взять  $0 < \nu < 2/\lambda_{\max}$ , где  $\lambda_{\max}$  — максимальное собственное значение матрицы  $G^T G$ .

Другой способ построения итерационного процесса, так называемый метод направленного расхождения [34], достаточно широко используется при обработке реакторных нейтронных спектров, где хорошо себя зарекомендовал.

Обратимся к исходному уравнению (9.91) и сделаем ряд тождественных преобразований:

$$\frac{U_i}{\sum_j G_{ij} \Phi_j} = 1; \quad \frac{U_i G_{il}}{\sum_j G_{ij} \Phi_j} = G_{il}; \quad \sum_i \frac{U_i G_{il}}{\sum_j G_{ij} \Phi_j} = \sum_i G_{il}. \quad (9.96)$$

Правая часть последнего равенства равна единице. Это следует из определения функции отклика как вероятности появления сигнала  $i$  при появлении частицы с энергией  $l$  (см. гл. 1). Умножая обе части равенства (9.96) на  $\Phi_l$ , получаем соотношение

$$\Phi_l = \Phi_l \sum_i \frac{U_i G_{il}}{\sum_j G_{ij} \Phi_j},$$

на основе которого строится итерационный процесс

$$\Phi_l^{(m+1)} = \Phi_l^{(m)} \sum_i \frac{U_i G_{il}}{\sum_j G_{ij} \Phi_j^{(m)}}.$$

Можно показать (см. [34]), что он сходится к точному решению.

## Глава 10. ОБРАБОТКА ЛИНЕЙЧАТЫХ СПЕКТРОВ

### 10.1. Постановка задачи

Под линейчатыми спектрами подразумеваются спектры, в которых энергии, массы и другие характеристики частиц или излучений принимают дискретные значения.

Из квантовой механики известно, что любая физическая система, локализованная в пространстве, имеет дискретный набор энергетических состояний. Это относится к атомам, ядрам и элементарным частицам. Отсюда следует, что излучения, возникающие в переходе квантовомеханической системы из одного состояния в другое, могут иметь только дискретные значения энергии, равные разности энергий состояний, между которыми произошел переход. Изучая спектры энергий испускаемых при этом частиц, можно восстанавливать спектр энергетических состояний системы, зная который, возможно делать более или менее определенные выводы о характере взаимодействия частиц, составляющих квантовомеханическую систему.

В свое время изучение закономерностей оптических атомных спектров позволило заложить основы квантовой механики атома. Исследование линейчатых спектров  $\gamma$ -излучения атомных ядер дало возможность понять многие особенности их строения и разобраться в характере действующих внутри ядра процессов, т.е. позволило исследовать свойства различных замкнутых квантовомеханических систем. Несомненно, что детальное изучение спектров масс элементарных частиц послужит основой для создания их количественной теории.

Изучение линейчатых спектров имеет и большое прикладное значение. Дело в том, что каждая конкретная система (например, конкрет-



ное ядро) имеет свой индивидуальный набор энергетических состояний и, следовательно, свой линейчатый спектр излучения, который является его меткой, идентификатором. Исследуя спектры образцов, по характерным линиям можно распознать наличие ядер данного типа в образце, а по интенсивности этих линий (числу квантов с данной энергией) можно судить о концентрации соответствующих ядер. На этом принципе основан метод активационного анализа. Если исследовать рентгеновские спектры энергий переходов между внутренними оболочками атома и по ним определять концентрацию атомов данного сорта, то мы получим метод рентгенофлуоресцентного анализа.

Как видно из сказанного, основная цель обработки спектра — определение энергии линии и ее интенсивности. Решение этой, казалось бы, простой задачи осложняется следующими обстоятельствами:

все спектрометры имеют конечное разрешение, в результате чего линия ( $\delta$ -функция) преобразуется в колоколообразную кривую, и если линий много, то такие кривые налагаются друг на друга, затрудняя анализ;

часто измерение линейчатого спектра сопровождается шумами и фоном, также затрудняющими анализ;

на практике спектр формируется как суперпозиция энергий большого количества индивидуальных частиц. Общее число таких зарегистрированных частиц конечно и случайно, что приводит к флуктуациям числа частиц с энергией в заданном диапазоне. Это также следует учитывать при анализе.

Вот уже много лет обработка спектров осуществляется с помощью ЭВМ. Это связано с большим количеством спектров, на ручную обработку которых потребовалось бы слишком много времени, и со сложностью самой обработки. Применение ЭВМ обычно требует строгой формализации методов и алгоритмов.

## 10.2. Обработка одномерных линейчатых спектров

Основные этапы анализа. Методы анализа линейчатых спектров ядерных излучений рассмотрим на примере линейчатых  $\gamma$ -спектров (рис. 10.1). Область спектра, где локализован какой-либо из имеющихся в спектре пиков, состоит из трех компонент: собственно пика, непрерывного спектра комптоновских электронов, фона посторонних частиц и импульсов шума. Две последних компоненты в пределах выделенной области спектра меняются незначительно, что позволяет без учета их природы считать их фоном, сопутствующим данному пику. В дальнейшем термин "фон" будет употребляться именно в этом смысле. Задача, таким образом, сводится к анализу пика, расположенного на некоторой "подложке" (фоне). При таком подходе анализ всего спектра разбивается на ряд независимых задач по обработке отдельных пиков или их скоплений и называется методом пиков.



Рис. 10.1. Типичный линейчатый спектр  $\gamma$ -квантов

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

Первый этап — идентификация пиков — заключается в отыскании областей спектра, где находятся пики. Алгоритм поиска должен определять границы области, где локализован пик, а также грубые оценки положения максимума и площади пика, используемые в дальнейшем в качестве начальных значений при более точном их определении методом наименьших квадратов.

Второй этап — анализ мультиплетности пиков. Поскольку в выделенной области может находиться несколько пиков, часто неразрешенных, для дальнейшего анализа важно знать их количество.

Третий этап — точное определение площади пиков и положения максимума. Обычно используются два способа определения этих параметров: 1) с предварительным вычитанием фона и последующей обработкой собственно пика; 2) аппроксимацией области пика, включая фон, одной аналитической зависимостью, параметры которой (и для пика, и для фона) находятся в процессе единой процедуры подгонки).

Четвертый этап обработки заключается в переходе от вычисленных значений площади пика и положения максимума, определенных в терминах числа отсчетов и каналов соответственно, к величинам, выраженным в единицах активности и энергии. Эта задача сводится к построению калибровочных кривых канал — энергия и энергия — эффективность, полученных в измерениях с изотопами, характеристики которых хорошо известны. Естественно, условия калибровочных измерений и экспериментов с неизвестными излучателями должны быть идентичны.

Наряду с перечисленными этапами анализа часто обработка спектра начинается с его сглаживания.

**Сглаживание спектра.** Сглаживание спектров имеет своей целью уменьшение статистических выбросов в аппаратурном спектре. Оно



заключается в замене отсчета в данном канале средневзвешенным значением отсчета в каналах, прилегающих к нему (включая рассматриваемый канал):

$$N_s(i) = \frac{\sum_{j=-k}^k W_j N(i+j)}{\sum_{j=-k}^k W_j}, \quad (10.1)$$

где  $N(i)$  – первоначальные значения отсчетов в каналах;  $N_s(i)$  – сглаженные значения отсчетов;  $W_j$  – веса, выбираемые обычно так, что  $W_j$  падает с увеличением  $j$  и  $W_j = W_{-j}$ .

Сглаживание довольно легко выполняется с помощью метода наименьших квадратов. Для этого выбирается  $2m+1$  последовательных точек (каналов) спектра с центром в точке  $i$ , в которой ищется сглаженное значение. Спектр на выбранном участке аппроксимируется полиномом  $r$ -го порядка (обычно 2-го или 3-го), и в качестве сглаженного значения принимается значение полинома в точке  $i$ . В результате сглаженное значение  $N_s(i)$  получается равным линейной комбинации исходных отсчетов:

$$N_s(i) = \frac{1}{A_k} \sum_{j=-k}^k C_j^{(k)} N(i+j), \quad (10.2)$$

где  $A_k$  и  $C_j^{(k)}$  – коэффициенты, значения которых легко определяются.

Достоинством этого способа сглаживания является то, что легко вычисляется не только сглаженный спектр, но и его производные, которые принимаются равными производным соответствующего аппроксимирующего полинома. Значения 1-й и 2-й производных необходимы иногда для автоматического поиска пиков.

Недостатком описанного способа является несохранение площади пика в результате сглаживания, хотя во многих случаях изменение площади в результате сглаживания меньше статистической погрешности в ее определении. Это изменение зависит от количества каналов, определяющих данный пик. Если это число мало и, следовательно, числа отсчетов в различных каналах сильно отличаются друг от друга, то изменение площади может быть большим.

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 пропускания этого спектра через линейный фильтр, спектральная характеристика пропускания  $L(\omega)$

которого не содержит высоких частот и отлична от нуля в интервале  $(-\omega_0, \omega_0)$ . В этом случае фурье-образы сглаженного и исходного спектров  $F_s(\omega)$  и  $F(\omega)$  связаны соотношением вида  $F_s(\omega) = L(\omega)F(\omega)$ , а сами спектры — выражением  $N_s(x) = \int K(x-s)N(s)ds$ , где

$$K(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} L(\omega) e^{-i\omega t} d\omega. \quad (10.3)$$

Здесь для простоты записи вместо дискретных переменных (номеров каналов) использованы непрерывные переменные. В реальном случае интеграл должен быть заменен суммой. Таким образом, этот метод практически не отличается от простейшего способа сглаживания, разобранный выше. Однако важным его достоинством является возможность контроля искажений, возникающих при сглаживании. При произвольном виде  $L(\omega)$  гауссов характер пиков не сохраняется. Исключение составляет функция  $L(\omega) = e^{-\alpha\omega^2}$ . Причем если  $L(0) = 1$ , то площадь сглаженного пика остается равной площади исходного пика. Анализ частотных характеристик исходного спектра и его флуктуаций обычно позволяет так подобрать  $L(\omega)$ , чтобы при малых флуктуациях искажения спектра оставались незначительными.

В качестве практического правила для выбора  $\omega_0$  можно рекомендовать следующий прием: если  $\Delta_{1/2}$  — ширина пика на половине высоты, то  $\omega_0 \Delta_{1/2} \approx 1$ . Необходимо обращать особое внимание на форму кривой  $L(\omega)$ . Если  $L(\omega)$  имеет слишком резкий спад при  $\omega = \omega_0$ , то в сглаженном спектре могут появиться осцилляции, имитирующие несуществующие пики.

**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, являющегося гладкой медленно меняющейся функцией.

Основные трудности, встречающиеся при идентификации пиков, таковы: 1) слабые пики, интенсивность которых превосходит среднеквадратичную флуктуацию фоновых отсчетов лишь втрое, трудно идентифицировать; 2) края спектров комптоновских электронов, соответствующих мощным линиям, идентифицируются как пики (см. рис. 10.1). Однако их можно отличить от истинных пиков, поскольку их положение по отношению к самим пикам известно. В этом случае возникает проблема идентификации линий, случайно попавших на край спектра комптоновских электронов другого пика; 3) при большом количестве пиков, когда они перекрываются друг с другом, трудно определить их границы для последующей отдельной обработки (рис. 10.2).

Рассмотрим основные методы поиска пиков.



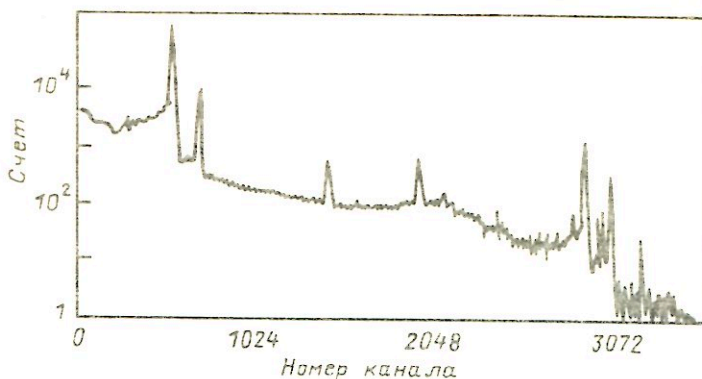


Рис. 10.2. Пример спектра с перекрывающимися линиями

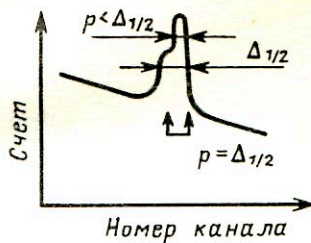
**Метод максимума.** В этом методе число отсчетов в каждом канале сравнивается с числами отсчетов в соседних каналах. Считается, что пик в  $i$ -м канале существует, если число отсчетов  $N(i)$  в нем удовлетворяет одновременно двум условиям:

$$\left. \begin{aligned} N(i) &> N(i-p) + h \sqrt{N(i)}; \\ N(i) &> N(i+p) + h \sqrt{N(i)}, \end{aligned} \right\} \quad (10.4)$$

где  $p$  и  $h$  подбираются эмпирически. Ясно, что наибольшая чувствительность метода будет достигнута, если  $p \approx \Delta_{1/2}$  (рис. 10.3). Однако в этом случае возможен пропуск пиков, сгруппированных в мультиплеты, так как каналы  $(-i)$  и  $(+i)$  могут принадлежать соседним пикам, поэтому критерий поиска не будет выполняться даже при наличии пиков. Чтобы избежать подобных пропусков, следует последовательно осуществлять поиск пиков в одном и том же спектре с различными  $p$ . Что касается величины  $h$ , то для несглаженного спектра она равна 2-3, а для сглаженного — существенно меньше и примерно  $(2 \div 3) (\sum_i W_i^2) / (\sum_i W_i)^2$ , где  $W_i$  — веса, используемые при сглаживании.

**Метод плавающего отрезка.** В этом методе сравнивается число отсчетов над некоторым отрезком, соединяющим две отстоящие на заданное расстояние точки спектра (это расстояние определяется размером основания стандартного пика), и возможной статистической флюктуацией этой величины. Область спектра, где выполняется соотношение  $S_1 > q \sqrt{S_2}$ , идентифицируется как пик. Здесь  $q$  — параметр отсева,  $q = 2 \div 4$  (подбирается экспериментально),  $S_1$  — число отсчетов над отрезком,  $S_2$  — сумма отсчетов под отрезком. Метод плавающего отрезка хорошо для случая малой статистики (менее 100 отсчетов в кана-

Рис. 10.3. Поиск пика методом максимума



ле), при которой он имеет преимущества перед методами, использующими производные, в скорости обработки и надежности.

**Метод первой производной.** Если аппаратный спектр представить как непрерывную функцию от номера канала, то по производной этой функции можно определить положение пиков. Действительно, в области пика производная спектра становится сначала большой положительной величиной, а затем, меняя в некоторой точке знак, — большой отрицательной, в то время как в области вне пика величина производной вследствие общего спадающего характера спектра всюду имеет небольшое отрицательное значение. Такую последовательность знаков производной можно использовать для идентификации пиков. Для этой цели задаются два положительных числа  $h_1$  и  $h_2$  и отыскиваются номера каналов, в которых одновременно выполняются следующие условия:

$$\left. \begin{aligned} N'(i-p) &> h_1; \\ N'(i) &\approx 0; \\ N'(i+p) &< -h_2, \end{aligned} \right\} \quad (10.5)$$

где  $N'(i)$  — величина производной спектра в  $i$ -м канале. Константы  $h_1$  и  $h_2$  подбираются экспериментально. В качестве оценки производной может использоваться ее конечно-разностный аналог. В случае дискретного спектра это просто разность отсчетов в двух соседних каналах.

**Метод второй производной.** Этот метод и его реализация аналогичны предыдущему методу с той разницей, что поиск пика в спектре производится по второй производной, которая аппроксимируется второй конечной разностью. Вторая производная фона всюду практически равна нулю, а в области пика она испытывает резкие изменения (рис. 10.4).

Считается, что пик в  $i$ -м канале существует, если вторая конечная разность

$$\Delta^2 N(i) = N(i+1) - 2N(i) + N(i-1) \quad (10.6)$$



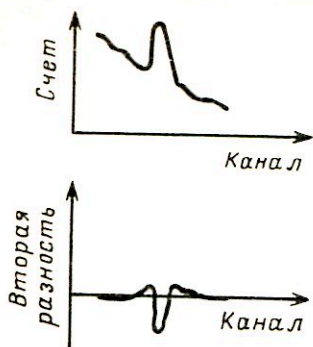
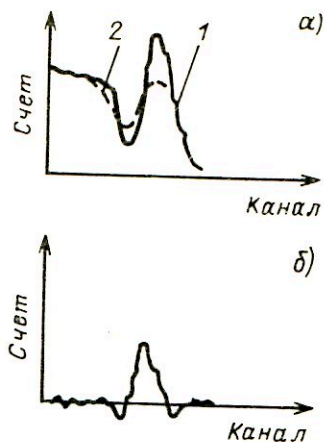


Рис. 10.4. Поиск пика методом второй производной

Рис. 10.5. Поиск пика методом сглаживания →



удовлетворяет следующим условиям:

$$\left. \begin{aligned} \Delta^2 N(i-p) &> h_1; \\ \Delta^2 N(i) &< -h_2; \\ \Delta^2 N(i+p) &> h_3, \end{aligned} \right\} \quad (10.7)$$

где положительные параметры  $h_1, h_2, h_3$  определяются эмпирически.

Такой метод весьма чувствителен к статистическим флюктуациям счета в каналах, и поэтому вторые разности обычно вычисляются для предварительно сглаженных спектров или, что практически то же самое, производится сглаживание вторых разностей исходного спектра. В этом случае  $\Delta^2 N(i)$  — более сложная функция, нежели выражение (10.6); обычно она является линейной комбинацией точек исходного спектра и иногда называется второй разностью.

Известно усовершенствование этого метода, заключающееся в том, что в качестве второй обобщенной разности принималась такая линейная комбинация точек исходного спектра, в которой в качестве коэффициентов используются значения второй производной от гауссовой функции, имеющей полуширину, равную полуширине анализируемых пиков. Действительно, как уже отмечалось при обсуждении алгоритмов сглаживания, сглаженный спектр  $N_s(x)$  может быть получен как свертка исходного спектра  $N(x)$  и импульсной характеристики фильтра  $K(x)$ :

$$N_s(x) = \int K(x-s)N(s) ds. \quad (10.8)$$

Тогда сглаженные значения второй производной исходного спектра определяются выражением

$$N_s''(x) = \int K''(x-s)N(s) ds. \quad (10.9)$$

К достоинствам данного метода и отчасти метода первой производной следует отнести тот, что при их использовании игнорируются края спектров комптоновских электронов, которые другими методами идентифицируются как пики. Легко видеть, что вторая производная участка спектра, содержащего край спектра комптоновских электронов, в отличие от пика не имеет положительного выброса, что может служить критерием для его отбрасывания.

**Метод сглаживания.** Согласно этому методу производится сильное сглаживание спектра, которое практически не действует на фон, но размывает пик. Вычитая сглаженный спектр 2 из исходного 1 (рис. 10.5, а), получаем характерный спектр (рис. 10.5, б), всюду близкий к нулю, кроме областей пиков, где имеется положительный выброс, наличие которого и идентифицируется как пик.

В нелинейном варианте метода сначала производится несильное сглаживание (рис. 10.6, а), после чего сглаженный спектр 2 сравнивается с исходным 1 и в тех точках исходного спектра, где его значения превышают значения сглаженного, производится замена этих значений на значения сглаженного спектра. После такой замены вершина пика будет "срезана" (спектр 3, рис. 10.6, б). Многократно повторяя описанную процедуру, в итоге получим только фон (спектр 4, рис. 10.6, в). Вычитая фон из исходного спектра, имеем "чистые" пики, которые отыскиваются просто по отклонению значений от нуля.

Недостатком обоих вариантов метода сглаживания являются трудности идентификации пиков, сгруппированных в мультиплеты. Этот метод непригоден для поиска пиков, расположенных вблизи краев спектра комптоновских электронов.

**Анализ мультиплетов.** При анализе мультиплетов в большинстве случаев используется экспериментальная зависимость ширины пика на половине высоты от номера канала анализатора, которая предварительно вводится в ЭВМ, обрабатывающую спектр. Эта зависимость позволяет сделать вывод о том, что данный пик не является синглетом. Так как при использовании такого критерия может быть пропущен мультиплет, представляющий собой сумму, например, двух пиков с резко различающимися интенсивностями применяют также различные тесты относительно степени асимметрии пика или сравнивают ширину на одной десятой высоты найденного пика с соответствующей величиной для

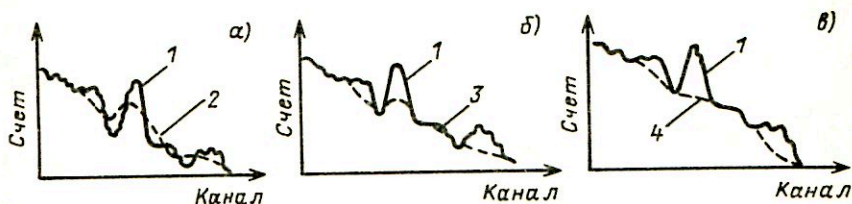


Рис. 10.6. Вариант метода сглаживания



заведомо синглетного пика. Рассмотрим некоторые методы разрешения мультиплетов, т.е. методы определения числа линий, составляющих мультиплет, и оценки их параметров.

Будем трактовать мультиплет как некоторый непрерывный спектр  $U(x)$ , получающийся "размытием" истинного спектра  $\Phi(E)$  аппаратурной линией спектрометра  $G(x, E)$  \*. В пределах мультиплета ширина и форма аппаратурной линии меняются мало, поэтому

$$U(x) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} G(x - E) \Phi(E) dE. \quad (10.10)$$

Относительно неизвестной функции  $\Phi(E)$  выражение (10.10) представляет собой уравнение типа свертки, устойчивое решение которого может быть найдено методом регуляризации (см. гл. 9). Отметим, что при любом численном решении уравнения (10.12) истинное решение  $\Phi(E)$  в виде набора  $\delta$ -функций нельзя получить хотя бы потому, что ширина канала анализатора конечна. Разумно поэтому сразу предполагать, что  $\Phi(E)$  — набор достаточно узких по сравнению с  $G(E)$  функций. Чем уже выбирается функция  $\Phi(E)$ , тем больший шум (осцилляции) будет иметь спектр после обработки. Компромисс между разрешением и шумом устанавливает исследователь.

**Определение площади отдельных пиков и положения их максимума.** Как уже отмечалось, существуют два способа определения площади отдельных пиков и положения их максимума. Первый предусматривает предварительное вычитание фона и последующее определение параметров пика либо численным анализом (т.е. определение площади пика и его центра тяжести путем сложения показаний в каналах анализатора с учетом соответствующих весов), либо путем аппроксимации пика некоторой кривой, содержащей несколько неизвестных параметров (в том числе площадь пика и положение максимума), которые определяются методом наименьших квадратов. Во втором способе область пика описывается суммой двух кривых, одна из которых относится к пику, а другая — к фону. Неизвестные параметры, входящие в выражения для этих кривых, отыскивают методом наименьших квадратов.

Первый из способов несколько проще в реализации, но он непригоден для сложных спектров, состоящих из большого числа линий, перекрывающих друг друга, поскольку для идентификации фона необходимы участки аппаратурного спектра, свободные от пиков, а в сложных спектрах такие участки нередко отсутствуют.

---

\* Так как мультиплет в линейчатом  $\gamma$ -спектре образуется наложением пиков полного поглощения от близко расположенных  $\gamma$ -линий, то в данном случае  $G(x, E)$  — часть аппаратурной линии, соответствующая пику полного поглощения (гауссиан).

Прежде чем обсуждать методы вычисления площади и положения максимума в присутствии фона, выясним, каковы предельные возможности такого определения. Очевидно, они реализуются, когда пик полностью изолирован и под ним отсутствует фон. В этом случае площадь пика равна

$$A = \sum_x N_x, \quad (10.11)$$

где  $N_x$  — число отсчетов в канале  $x$ , и суммирование ведется по каналам, в которых расположен пик. Отсюда следует, что погрешность в определении площади имеет вид

$$\sigma_A = \sqrt{A} = \sqrt{\sum_x N_x}. \quad (10.12)$$

Положение максимума определяется по формуле

$$\bar{x} = \frac{\sum_x N_x x}{A}, \quad (10.13)$$

а его погрешность по формуле

$$\sigma_{\bar{x}} = \sigma_x / A, \quad (10.14)$$

где

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{A-1} \sum_x N_x (x - \bar{x})^2 \approx \frac{\Delta_{1/2}}{2,35},$$

т.е.

$$\sigma_{\bar{x}} = \sqrt{\frac{\sum_x N_x (x - \bar{x})^2}{A(A-1)}} \approx \frac{\Delta_{1/2}}{2,35 \sqrt{A}}, \quad (10.15)$$

где  $\Delta_{1/2}$  — ширина пика на половине высоты. Приведенные формулы указывают, какова наилучшая точность в определении площади и положения максимума. Такие точности из-за наличия фона реально недостижимы, однако они могут служить эталоном, с которым можно сравнивать точность практических методов.

Простейший способ анализа изолированного пика в присутствии фона заключается в том, что если пик расположен на  $L$  каналах ( $L$  — четное), что справа и слева от него выделяется  $L/2$  каналов, числа отсчетов в которых суммируются. Ясно, что если фон представляет собой линейную функцию (это предполагается в методе), то сумма отсчетов  $B$  в этих областях является оценкой фона под пиком, а  $\sqrt{B}$  — оценкой погрешности фона.



Тогда параметры пика и их погрешности могут быть вычислены по формулам\*:

$$1) \text{ площадь пика } A: A = \sum_x N_x - B; \quad (10.16)$$

2) погрешность площади  $\sigma(A)$ :

$$\sigma_A = \sqrt{\frac{\sum N_x + B}{x}} = \sqrt{A + 2B}; \quad (10.17)$$

3) положение центра пика  $\bar{x}$ :

$$\bar{x} = \frac{1}{A} \sum_x (N_x - B_x) x, \quad (10.18)$$

где  $B_x$  — значение фона в  $x$ -м канале, полученное путем линейной интерполяции на основе значений вне пика;

4) погрешность положения центра пика:

$$\sigma_{\bar{x}} = (1/A) \sqrt{\frac{\sum (N_x + B_x) (x - \bar{x})^2}{x}}. \quad (10.19)$$

Формулы для погрешностей основаны на предположении, что  $\sigma_B \approx \sqrt{B_x}$ .

В целях обоснованного выбора вида функции, аппроксимирующей пик полного поглощения, проводились специальные исследования одиночных линий полного поглощения со статистикой более чем  $10^6$  импульсов при фоне порядка нескольких сот событий на канал. Коэффициент усиления и ширина канала подбирались таким образом, чтобы полуширина пика полного поглощения была около 30–40 каналов. Сравнение различных моделей одиночных линий по критерию  $\chi^2$  позволило сделать следующие выводы: центральная часть пика полного поглощения хорошо описывается распределением Гаусса; асимметрия проявляется лишь в хвостах чистого гауссиана и при низких скоростях счета заметна только слева от максимума; асимметрию можно описать в виде двух аддитивных членов, условно названных функциями "ступеньки" и "хвоста"; полную функцию распределения сигналов вблизи максимума пика полного поглощения можно представить в виде

$$F(x) = G(x) + S(x) + D(x) + B(x), \quad (10.20)$$

где  $x$  — номер канала;  $B(x)$  — линейный фон; гауссиан  $G(x) =$

---

\* Подчеркнем, что формулы справедливы лишь при указанном способе вычисления фона. Если фон оценивается иначе (например, по двум крайним точкам пика), то они несправедливы.

$= H_G \exp [-(x - x_0)^2 / 2\sigma^2]$ ; функция "ступеньки"

$$S(x) = \frac{1}{2} H_S \{ 1 - \operatorname{erf} [-(x - x_0) / \sigma \sqrt{2}] \};$$

функция "хвоста"

$$D(x) = \begin{cases} H_D \exp [(x - c) / \beta], & x < x_1; \\ H_D \exp [-(x - c)^2 / 2\delta^2], & x > x_1 \end{cases} \quad (10.21)$$

$[x_1 - \text{точка сшивки двух частей } D(x), \text{ причем } x_1 = c - 2\delta^2 / \beta]$ .

Таким образом, для полного описания формы пика (рис. 10.7) вводится восемь варьируемых при подгонке параметров. Важно отметить, что столь подробная параметризация оправдала лишь в особо прецизионных экспериментах, выполненных с большой статистикой, когда отличия от гауссовой формы пика статистически значимы. Во всех остальных случаях вполне удовлетворительно использование чистого гауссиана.

Параметры функции  $F(x, \alpha)$  [или гауссиана  $G(x)$ ] находят минимизацией взвешенной суммы квадратов отклонений:

$$S(\alpha) = \sum_{x=x_{\min}}^{x=x_{\max}} \frac{1}{N(x)} (N(x) - F(x, \alpha))^2, \quad (10.22)$$

где  $N(x)$  — отсчет в  $x$ -м канале спектра;  $\alpha$  — вектор неизвестных параметров;  $x_{\min}, x_{\max}$  — номера каналов, ограничивающих область пика. Минимизация выражения (10.22) осуществляется численно. Существует много хорошо разработанных методов минимизации, с которыми можно ознакомиться в учебных пособиях и монографиях по численным методам [30 — 33].

**Определение интенсивностей и энергий пиков.** В результате выполнения предыдущего этапа получены оценки положения максимумов и площадей пиков в терминах "номер канала" и "число отсчетов". Финальная стадия обработки линейчатого спектра заключается в переходе от номера канала к энергии и от числа отсчетов к интенсивности  $\gamma$ -перехода, породившего соответствующий пик. Указанные операции

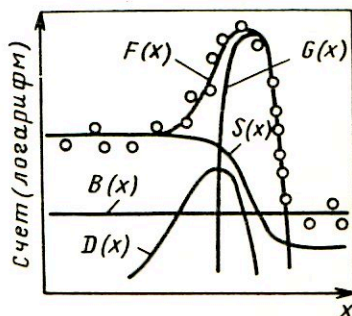


Рис. 10.7. Аппроксимация пика аналитическим выражением. Точками обозначены экспериментальные значения



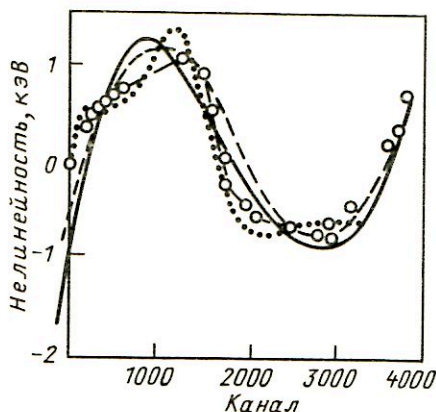
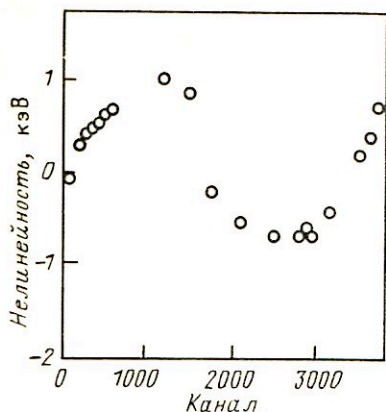


Рис. 10.8. Нелинейность спектрометрического тракта

Рис. 10.9. Подгонка нелинейности полиномами различных степеней:

— — полиномы 5-го порядка; - - - - 3-го порядка; ... - 9-го порядка;  
 ○○ - линейная интерполяция

осуществляются с помощью калибровочных кривых "канал — энергия" и "энергия — эффективность", полученных в экспериментах с изотопами, характеристики которых хорошо известны. В прецизионной спектрометрии обычно используется не сама зависимость "канал — энергия", а функция, характеризующая ее отклонение от прямой (рис. 10.8). Для нахождения энергии пика, центр которого может быть в любом канале, необходимо иметь аналитическое выражение функции нелинейности. Задача сводится к аппроксимации набора точек, измеренных с определенной погрешностью. Рассмотрим некоторые методы такой аппроксимации.

**Метод наименьших квадратов (МНК).** Набор калибровочных точек аппроксимируется полиномом, параметры которого находятся с помощью линейного МНК. Метод дает удовлетворительные результаты только для сравнительно простой формы функции нелинейности. При наличии выраженной структуры в совокупности калибровочных точек, приведенных на рис. 10.8, полиномы низкого (2-го, 3-го) порядка дают систематические сдвиги, заметно превышающие погрешности измерения (рис. 10.9). Полиномы высокого порядка, коэффициенты которых определены по МНК, характеризуются лишними физического смысла осцилляциями, которые появляются там, где калибровочные точки расположены наиболее плотно (по этой причине неприемлемо использование интерполяционного полинома Лагранжа).

Несколько улучшить качество аппроксимации удастся, если проводить по небольшому числу калибровочных точек (четыре-пять точек

на интересующем 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 удастся найти удачную аппроксимацию по всем точкам калибровочного набора.

**Метод наименьших квадратов на основе сплайнов.** Следующий шаг по усовершенствованию аппроксимации заключается в наложении на эти частичные полиномы условий сшивки, объединяющих все полиномиальные участки в единую гладкую функцию. Техника нахождения коэффициентов такой функции состоит в следующем.

Пусть необходимо провести гладкую кривую через экспериментальные точки, измеренные с погрешностью. В качестве интерполятора выбран кубический сплайн, состоящий из двух кусков  $f_1$  и  $f_2$ . В линейном методе наименьших квадратов коэффициенты в  $f_1$  и  $f_2$  находят из условий минимума квадратичных форм

$$\left. \begin{aligned} S_1 &= \sum_{i=1}^{i_{\text{ГР}}} \frac{1}{\sigma_i^2} [y_i - f_1(x_i, \alpha_1)]^2; \\ S_2 &= \sum_{i=i_{\text{ГР}}}^n [y_i - f_2(x_i, \alpha_2)]^2, \end{aligned} \right\} \quad (10.23)$$

где  $\sigma_i$  — среднеквадратическая погрешность измерения  $y_i$ .

Найденные полиномы  $f_1$  и  $f_2$  не обязаны сшиваться в граничной точке  $x_{i_{\text{ГР}}}$  ни по значениям  $f_1$  и  $f_2$ , ни по значениям их производных, однако условия сшивки легко учесть при минимизации  $S_1$  и  $S_2$ , воспользовавшись методом поиска условного экстремума с помощью неопределенных множителей Лагранжа. Будем минимизировать выражение  $R = S_1 + S_2 + \sum \lambda_i \Psi_i$ , где  $\lambda_i$  — неопределенные множители Лагранжа;  $\Psi_i$  — условия сшивки, записанные в виде  $\Psi_i = 0$ .

Коэффициенты  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  находят из системы

$$\partial R / \partial \alpha_i = 0, \quad i = 1 \div N; \quad \Psi_j = 0, \quad j = 1 \div M,$$

где  $N$  — число коэффициентов в  $f_1$  и  $f_2$ , занумерованных последовательно;  $M$  — число условий сшивки ( $N = 8, M = 3$ ).

В явном виде функции  $\Psi_j$  имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_1 &= f_1(x_{i_{\text{ГР}}}) - f_2(x_{i_{\text{ГР}}}); \\ \Psi_2 &= f_1'(x_{i_{\text{ГР}}}) - f_2'(x_{i_{\text{ГР}}}); \\ \Psi_3 &= f_1''(x_{i_{\text{ГР}}}) - f_2''(x_{i_{\text{ГР}}}). \end{aligned} \right\} \quad (10.24)$$

Все сказанное относится к калибровке спектрометров по эффектив-



ности. В спектрометрах  $\gamma$ -квантов наиболее частый способ ее представления — это полином наибольшего порядка в логарифмическом масштабе

$$\ln \epsilon(E) = \sum_{i=0}^n \alpha_i E^i . \quad (10.25)$$

Однако появление осцилляций при неудачном выборе степени полинома возможно и здесь.

При сравнении результатов измерения энергий и относительных интенсивностей ядерных переходов различными автоматами при их анализе обычно наибольшие претензии вызывает процедура калибровки. Если выбрана конкретная модель калибровочной кривой, то хороший результат при проверке гипотезы о согласии такой модели с данными свидетельствует только о согласии в измеренных точках и ничего не говорит о нем в остальных точках. Лучшие по сравнению с другими моделями результаты, даваемые моделью сплайнов, являются следствием того, что сплайны априори обладают свойством гладкости, отражающим физические свойства спектрометрических траектов. Однако даже в этом случае было бы весьма полезно иметь какой-нибудь способ объективной оценки проведения калибровочной кривой в неизмеренных точках.

Такой способ, названный методом расщепления или джекнайф-оценкой и носящий частично эвристический характер, широко применяется в практике обработки данных в последние годы. Все данные в этом методе (в нашем случае — калибровочные точки) разбивают (расщепляют) на две группы: по точкам первой группы на основе заданной модели вычисляют параметры калибровочной кривой, а в точках второй группы вычисляют отклонения экспериментальных данных от полученной кривой. Из вычисленных отклонений конструируют некоторую меру отклонения. Совершив разбиение несколько раз различными способами, можно получить среднее значение меры отклонения, которое характеризует качество подгонки кривой выбранной моделью. Среди нескольких моделей следует выбрать ту, у которой среднее значение минимально. В конце вычисляют параметры модели по всем точкам.

В простейшем случае можно ограничиться следующей процедурой. Из калибровочных данных выбрасывают точку  $(x_i, y_i)$ . По остальным точкам для модели  $y = f(x, \alpha)$  вычисляют оценку вектора параметров  $\alpha_i$  (индекс  $i$  здесь означает, что оценка сделана в отсутствие  $i$ -й точки). Далее вводят меру отклонения  $\Delta_i^2 = [y_i - f(x_i, \alpha)]^2$ . Прделав указанную процедуру поочередно для всех точек  $x_i$ , можно найти все  $\Delta_i^2$  и вычислить среднюю меру отклонения

$$\Delta^2 = \frac{1}{n} \sum_i \Delta_i^2 . \quad (10.26)$$

Видно, что изложенный метод имитирует анализ поведения кривой в неизмеренных точках (их роль выполняют отбрасываемые точки). Хотя он не дает исчерпывающего ответа на вопрос о качестве модели, но на практике достаточно эффективно оценивает это качество.

Существует другая серьезная проблема. Значения энергий эталонных  $\gamma$ -линий, как правило, не могут быть определены в прямых измерениях и получаются путем сравнения с известными абсолютными значениями. Большая часть существующих в настоящее время энергетических констант происходит от одного из двух известных значений: энергии аннигиляции электрон-позитронной пары и вычисленной на ее основе энергии  $\gamma$ -линии  $411,794 \pm 0,007$  кэВ  $^{198}$ Но и энергии  $K\alpha_1$ -линии  $59,31918 \pm 0,00036$  кэВ W.

Тот факт, что эталонные источники калибруются по одной энергии, приводит к корреляции значений их энергий, которая должна учитываться при проведении калибровочных кривых и вычислении энергий и их погрешностей для исследуемых источников.

Особенно значительными корреляции будут в случае, если группа эталонных  $\gamma$ -линий калибруется в совместном эксперименте. Однако если даже в каждом эксперименте калибруется лишь одна эталонная  $\gamma$ -линия, определенность в определении значения абсолютной константы приводит к корреляции по всем значениям энергий  $\gamma$ -линий, калиброванных по данному абсолютному значению.

Часто случается, что не известна ковариационная матрица значений энергий используемых калибровочных источников и, естественно, предполагается их независимость. В результате могут получиться неправильные значения энергий  $\gamma$ -линий и их погрешностей.

### 10.3. Обработка многомерных спектров

**Особенности обработки многомерных спектров.** В экспериментальных методах изучения структуры атомного ядра все более важное значение приобретает многомерный корреляционный анализ характеристик ядерного излучения. Так, информация, получаемая при анализе спектров  $\gamma - \gamma$ ,  $e - \gamma$ ,  $\alpha - \gamma$ -совпадений, оказывается незаменимой при построении схем распада ядер. Одновременное измерение энергии и временных интервалов между испусканиями  $\gamma$ -квантов позволяет определить вероятность электромагнитных переходов, а анализ пространственных корреляций типа  $\gamma - \gamma - \Theta$  ( $\Theta$  — угол разлета  $\gamma$ -квантов) дает ценную информацию о спинах, четности, магнитных и квадрупольных моментах основных и возбужденных состояний ядер. Широкое распространение получил многомерный анализ в экспериментальной физике тяжелых ионов и физике деления для идентификации частиц по массам, ионным и ядерным зарядам и т.д.

Рассмотрим особенности обработки многомерной спектрометрической информации на примере спектров  $\gamma - \gamma$ -совпадений. Типичный



спектр  $\gamma - \gamma$  совпадений содержит порядка  $2 \cdot 10^6$  событий на  $16 \cdot 10^6$  каналов. Регистрация такого спектра в режиме прямого интегрированно-го накопления канал — отсчет практически невозможна, поэтому многомерные области записывают последовательно друг за другом без сортировки по каналам. Обработка полученной в таком виде информации сопряжена с многократными сортировками, на что и тратится основное время. Неинтегрированный характер и многомерность затрудняют графическое представление информации, а также оперативный контроль за ходом эксперимента.

Возможны два подхода к обработке двумерных спектров  $\gamma - \gamma$  совпадение: поиск пиков совпадений непосредственно на плоскости переменных  $E_{\gamma_1} - E_{\gamma_2}$  и анализ интегральных спектров, полученных суммированием двумерного спектра по одной из переменных. Достоинство первого подхода состоит в возможности разделения пиков, абсолютно неразрешимых на одномерном спектре (например, пики  $\gamma - \gamma$  совпадений 102–115 и 103–160 кэВ дадут в интегральном спектре по первому тракту полностью неразрешенный дублет). Преимущество рассматриваемого подхода иллюстрирует такой пример: если на плоскости  $4096 \times 4096$  каналов записан спектр с фоном в среднем 1 отсчет в канале, то двумерный пик объемом 100 событий даст в интегральном спектре одномерный пик площадью 100 событий на фоне порядка 4000 отсчетов в канале, т.е. пик полностью потеряется на уровне фона. Анализ интегральных спектров обладает своими преимуществами: малые затраты времени на контроль, простота графического представления и обработки пиков. На практике находят применение оба подхода к обработке двумерных спектров.

**Метод окон.** Алгоритм обработки двумерных спектров методом окон включает следующие этапы.

1. Во время набора спектра или путем сортировки формируются **интегральные спектры** данного двумерного спектра.

2. На полученных таким образом спектрах экспериментатор размечает интересующие его окна, в которые попадают как исследуемые линии, так и участки фона вблизи них. Сортировка всей информации в эти окна дает **спектры отклика окон**.

3. Автоматическая и интерактивная обработка спектров отклика, соответствующих окну с интересующей экспериментатора  $\gamma$ -линией и фоновому окну, позволяет судить о наличии и интенсивности совпадений.

Недостаток изложенного метода состоит в том, что для сложных спектров трудно выделить фоновые окна в непосредственной близости от пиков, а фоновые окна, взятые в стороне от линий, не позволяют объективно оценить фон под исследуемым пиком.

Описанный метод окон несколько модифицируется, когда требуется лишь уточнить ранее полученную схему распада. В этом случае на основе известного фрагмента схемы распада изучаемого изотопа и

данных о списке  $\gamma$ -линий, содержащихся в спектре, по специальной программе формируют список возможных пиков совпадений. По калибровочным зависимостям энергия — канал определяют положение этих пиков в аппаратурном спектре. Весь спектр разбивают на участки и приводят сортировку событий в заданные двумерные участки. Каждый из участков последовательно аппроксимируется аналитическим выражением

$$f = a + bE_x + cE_y + \\ + \sum_i \sum_k s_{ij} \exp \left[ -\frac{(E_x - E_{x_i})^2}{2\sigma_{x_i}^2} - \frac{(E_y - E_{y_k})^2}{2\sigma_{y_k}^2} \right] + \\ + \sum_i d_i \exp \left[ -\frac{(E_x - E_{x_i})^2}{2\sigma_{x_i}^2} \right] + \sum_k g_k \exp \left[ -\frac{(E_y - E_{y_k})^2}{2\sigma_{y_k}^2} \right], \quad (10.27)$$

где  $a$ ,  $b$ ,  $c$  — параметры фона спектра совпадений  $\gamma$ -квантов, испытавших комптоновское рассеяние;  $d_i$  и  $g_k$  определяют интенсивность совпадений фотопиков с комптоновским фоном;  $s_{ij}$  определяет амплитуду пиков совпадений  $\gamma$ -квантов с энергиями  $E_{x_i}$  и  $E_{y_k}$ ;  $\sigma_{x_i}^2$ ,  $\sigma_{y_k}^2$  — дисперсии соответствующих пиков.

Если в результате подгонки значение  $\chi^2$  для обрабатываемого участка превышает заданный предел, то участок обрабатывается еще раз по учтенной модели (т.е. новым списком линий, содержащихся на участке).

**Определение параметров пиков  $\gamma$ — $\gamma$ совпадений.** Целью обработки двумерного спектра  $\gamma$ — $\gamma$ совпадений является определение положения максимумов и объемов пиков совпадений. Задача определения параметров пиков совпадений решается в два этапа.

На первом этапе обрабатываются интегральные спектры каждого двумерного участка, содержащего пики совпадений. Определяется число пиков и оцениваются их параметры. С этой целью интегральный спектр участка аппроксимируется аналитической функцией вида

$$f(x, p) = p_1 x + p_2 + \sum_{k=1}^{k_{\max}} a_k \exp \left[ -\frac{(x - c_k)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (10.28)$$

где  $p_1$  и  $p_2$  — параметры линейного фона. Пики описываются гауссианами, поскольку более детальное описание формы аппаратурной линии оказывается статистически необеспеченным.

Если форма или дисперсия пика в интегральном спектре окна позволяет предположить, что пик представляет собой сумму нескольких наложенных друг на друга пиков, то необходимо решить задачу по разделению такого неразрушенного мультиплета (рецепт решения этой задачи методом регуляризации см. в § 10.1).



Технически аппроксимация двумерного участка поверхностью проводится методом максимального правдоподобия. Следует отметить, что при числе отсчетов в канале двумерного спектра меньше десяти необходимо пользоваться распределением Пуассона, а не Гаусса при написании функции максимального правдоподобия. Можно показать, что в этом случае задача нахождения параметров функции сводится к решению системы нелинейных уравнений вида

$$\sum_{x=1}^{x_{\max}} \sum_{y=1}^{y_{\max}} \left( 1 - \frac{N_{xy}}{f(a, x, y)} \right) \frac{\partial f(a, x, y)}{\partial a_q} = 0,$$

$$q = 1, \dots, Q, \quad (10.29)$$

где  $Q$  — число варьируемых параметров;  $x_{\max}, y_{\max}$  — размеры участка двумерного спектра;  $N_{xy}$  — участок двумерного спектра.

После того как найдены положение и объем пиков совпадений в терминах соответственно номер канала и число отсчетов, необходимо, как и в случае одномерных спектров, перейти к физическим единицам. Переход осуществляется с использованием калибровочных зависимостей канал—энергия и канал—эффективность.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абрамов А.И., Казанский Ю.А., Матусевич Е.С. Основы экспериментальных методов ядерной физики: Учебник для вузов. — 3-е изд., перераб. и доп. М.: Энергоатомиздат, 1985.
2. Альфа-, бета- и гамма-спектроскопия: Пер. с англ./Под ред. К. Зигбана. М.: Атомиздат, 1969. Вып. 1.
3. Берлович Э.Е., Василенко С.С., Новиков Ю.Н. Времена жизни возбужденных состояний атомных ядер. Л.: Наука, 1972.
4. Варганов Н.А., Самойлов П.С. Прикладная сцинтилляционная гамма-спектроскопия. М.: Атомиздат, 1969.
5. Гольч П.М., Залобовский И.И. Ядерная спектроскопия. Харьков: Вища школа, 1980.
6. ГОСТ 26874—86. Спектрометры энергии ионизирующего излучения. Основные параметры. М.: Изд-во стандартов, 1986.
7. ГОСТ 15484—81. Излучения ионизирующие и их измерение. Термины и определения. М.: Изд-во стандартов, 1981.
8. Гусев Н.Г., Дмитриев П.П. Радиоактивные цепочки распада: Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1988.
9. Джелепов Б.С. Методы разработки сложных схем распада. Л.: Наука, 1974.
10. Джелепов Б.С., Шестопалова С.А. Ядерно-спектроскопические нормалы. М.: Атомиздат, 1980.
11. Калашникова В.И., Козодаев М.С. Детекторы элементарных частиц. М.: Наука, 1966.
12. Карнаухов В.А., Петров Л.А. Ядра, удаленные от линии бета-стабильности. М.: Энергоатомиздат, 1981.

13. Келлер К. Радиохимия: Пер. с нем./Под ред. Б.Ф. Мясоедова. М.: Атомиздат, 1978.
14. Климов А.Н. Ядерная физика и ядерные реакторы: Учебник для вузов.— 2-е изд., перераб. и доп. М.: Энергоатомиздат, 1985.
15. Мухин К.Н. Экспериментальная ядерная физика. Учебник для вузов. — 4-е изд., перераб. и доп. М.: Энергоатомиздат, 1983. Т. 1: Физика атомного ядра.
16. Ободовский И.М. Преобразование энергии ионизирующего излучения в вещество. М.: изд-во МИФИ, 1981.
17. Экспериментальные исследования полей гамма-излучения и нейтронов/ Под ред. Ю.А. Егорова. М.: Атомиздат, 1974.
18. Knowles J.W.//Nucl. Instrum. and Methods. 1979. Vol. 162. Pt. 1—3. P. 677—698.
19. Козлов И.Г. Современные проблемы электронной спектроскопии. М.: Атомиздат, 1978.
20. Третьяков Е.Ф.//Изв. АН СССР. Сер. физ. 1975. Т. 39. С. 583—600.
21. Перегуд Б.П.//Журн. техн. физ. 1972. Вып. 3. С. 457—465.
22. Айнбуд М.Р., Поленов Б.В. Вторично-электронные умножители открытого типа и их применение. М.: Энергоатомиздат, 1981.
23. Pal L. e.a. Correlation type time-of-flight spectrometer with magnetically chopped polarized neutron beam. Preprint KFKI 7/1968.
24. Гуревич И.И., Тарасов Л.В. Физика медленных нейтронов. М.: Наука, 1965.
25. Власов Н.А. Нейтроны. М.: Наука, 1971.
26. Крамер-Агеев Е.А., Трошин В.С., Тихонов Е.Г. Активационные методы спектрометрии нейтронов. М.: Атомиздат, 1976.
27. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1986.
28. Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Киев: Наукова думка, 1986.
29. Турчин В.Ф., Козлов В.П., Малкевич М.С.//Успехи физ. наук. 1970. Т. 102. Вып. 3. С. 345—386.
30. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование.: Пер. с англ. М.: Мир, 1975.
31. Фиакко А., Мак-Кормик Г. Нелинейное программирование. Методы безусловной последовательной минимизации: Пер. с англ. М.: Мир, 1972.
32. Полак Э. Численные методы оптимизации: Пер. с англ. М.: Мир, 1974.
33. Дегтярев Ю.И. Методы оптимизации. М.: Советское радио, 1980.
34. Тараско М.З. Об одном методе решения линейных систем со стохастическими матрицами. Препринт ФЭИ-156. Обнинск, 1969.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . .	3
Введение . . . . .	4
<i>Глава 1. Спектрометрия ядерных излучений</i> . . . . .	10
1.1. Предмет ядерной спектрометрии . . . . .	10
1.2. Характеристики ядер и ядерные превращения . . . . .	10
1.3. Спектры ядерных излучений . . . . .	49
1.4. Спектрометры ядерного излучения . . . . .	62
1.5. Метрологическое обеспечение ядерно-спектрометрических экспериментов . . . . .	79



<i>Глава 2.</i> Магнитные спектрометры . . . . .	91
2.1. Принцип действия и основные характеристики спектрометров	91
2.2. Спектрометр с однородным магнитным полем и полукруговой фокусировкой . . . . .	95
2.3. Спектрометр с двойной фокусировкой на угол $\pi\sqrt{2}$ . . . . .	98
2.4. Спектрометры с секторным полем . . . . .	101
2.5. Спектрометр с продольным магнитным полем . . . . .	103
<i>Глава 3.</i> Ионизационные спектрометры . . . . .	106
3.1. Принцип действия ионизационного спектрометра . . . . .	106
3.2. Флюктуации числа пар ионов . . . . .	113
3.3. Баллистический эффект . . . . .	121
3.4. Влияние неполного собирания заряда на энергетическое разрешение ионизационных детекторов . . . . .	123
3.5. Флюктуации коэффициента газового усиления в пропорциональных счетчиках . . . . .	131
<i>Глава 4.</i> Спектрометры со сцинтилляционными детекторами . . . . .	134
4.1. Принцип действия и основные характеристики спектрометров	134
4.2. Типы сцинтилляционных гамма-спектрометров . . . . .	142
<i>Глава 5.</i> Кристалл-дифракционная спектрометрия $\gamma$ -излучения . . . . .	148
5.1. Основы кристалл-дифракционного метода . . . . .	148
5.2. Основные характеристики кристалл-дифракционных спектрометров . . . . .	153
5.3. Спектрометры с изогнутым кристаллом . . . . .	157
5.4. Спектрометры с двумя плоскими кристаллами . . . . .	161
5.5. Области применения кристалл-дифракционных спектрометров	162
<i>Глава 6.</i> Определение энергии и идентификации частиц по их поглощению в веществе . . . . .	163
6.1. Определение энергии и идентификации заряженных частиц по удельным ионизационным потерям . . . . .	163
6.2. Определение энергии частиц по пробегу или длине следа . . . . .	165
6.3. Измерение энергии рентгеновских и $\gamma$ -квантов по функции пропускания. Метод критического поглощения . . . . .	170
<i>Глава 7.</i> Методы спектрометрии нейтронов . . . . .	171
7.1. Метод времени пролета . . . . .	171
7.2. Корреляционный метод измерения временных спектров нейтронов . . . . .	185
7.3. Интегральные методы определения нейтронных спектров [26]	188
7.4. Метод ядер отдачи . . . . .	190
7.5. Метод кристаллического монохроматора . . . . .	193
<i>Глава 8.</i> Методы определения характеристик ядер. Восстановление схем распада . . . . .	196
<i>Глава 9.</i> Обработка непрерывных спектров . . . . .	210
9.1. Основное уравнение . . . . .	210
9.2. Существование, единственность и устойчивость решения . . . . .	213
9.3. Особенности постановки задачи в дискретном случае . . . . .	217
9.4. Плохо обусловленные системы уравнений . . . . .	221
9.5. Некорректность задачи восстановления спектров . . . . .	222
9.6. Метод регуляризации А.Н. Тихонова . . . . .	224
9.7. Метод статистической регуляризации . . . . .	230
9.8. Метод регуляризации М.М. Лаврентьева [28] . . . . .	232
9.9. Методы итеративной регуляризации [28] . . . . .	233
<i>Глава 10.</i> Обработка линейчатых спектров . . . . .	235
10.1. Постановка задачи . . . . .	235
10.2. Обработка одномерных линейчатых спектров . . . . .	236
10.3. Обработка многомерных спектров . . . . .	251
Список литературы . . . . .	254

