



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

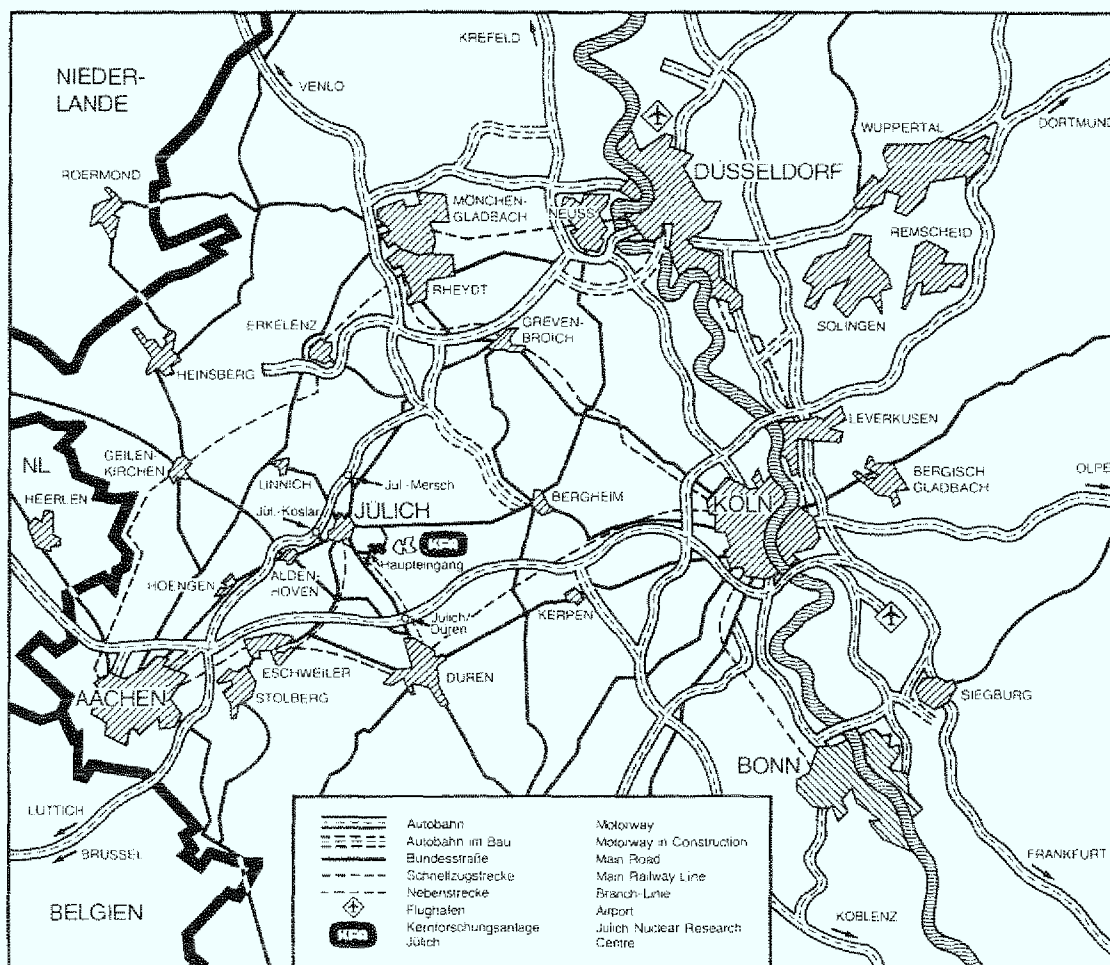
**Institut für Plasmaphysik
Association EURATOM-KFA**

**Entfaltung von Kernstrahlungs-Spektren
mit Hilfe der Methode
der kleinsten Quadrate**

von

H. J. Belitz, M. Hinken, I. Mohnes

**Jül – 2053
April 1986
ISSN 0366 – 0885**



Als Manuskript gedruckt

Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 2053

Institut für Plasmaphysik
Association EURATOM-KFA JÜL – 2053

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH
Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)
Telefon: 024 61/610 · Telex: 833556-0 kf d

Entfaltung von Kernstrahlungs-Spektren mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate

von

H. J. Belitz, M. Hinken, I. Mohnes

Kurzfassung

Mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate können in einfacher Weise für die Praxis hinreichend genaue Lösungen des Faltungsintegrals durch Iteration erhalten werden. Bei Kontinuum-Strahlung berücksichtigt das Verfahren die Forderung, daß die Strahlungsintensitäten nicht negativ sein dürfen. Im Falle einer Linien-Strahlung bekannter Struktur erhält man die die Linienstruktur charakterisierenden Parameter. Die Summe der Quadrate der Residuen ist ein Maß für die Genauigkeit des Entfaltungsprozesses. Die beschriebenen Verfahren können platzsparend programmiert und auch auf kleinen Prozessrechnern implementiert werden.

Abstract

Using Least Square Methods one easily may get solutions of the convolution integral by iteration, satisfactory for practical purposes. For continuum radiation the method takes into account the condition that the radiation intensities must be nonnegative. For a line radiation of known structure the parameters characterising that structure are determined. The sum of the squares of the residuals gives the accuracy of the deconvolution procedure. The programs for the described methods need little space; they may be implemented even in small computers.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Entfaltung von Spektren nach der Methode der kleinsten Quadrate	
2.1 Die Ausgangsgleichung	3
2.2 Linienstrahlung	12
2.3 Kontinuum-Strahlung	19
3. Anwendungen	
3.1 Vorbemerkungen	24
3.2 Response-Funktion und Auflösungsvermögen	25
3.3 Entfaltung von Kontinuum-Spektren	
3.3.1 Langzeit-Messung	29
3.3.2 Kurzzeit-Messung	31
3.4 Entfaltung von Linien-Spektren	
3.4.1 Vorbereitende Untersuchungen	34
3.4.2 Das Apparate-Profil	35
3.4.3 Bestimmung der Linienbreite	37
3.5 Back Bias	46
4. Zusammenfassung	49
Literaturverzeichnis	52

1. Einleitung

In der Spektroskopie spielen Integralgleichungen der Form

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} R(x'-x) \cdot f(x') \cdot dx' \quad (1)$$

eine fundamentale Rolle. Es bedeuten $f(x')$ die Intensitätsverteilung der (wahren) Strahlung eines Systems, $g(x)$ die gemessene spektrale Verteilung dieser Strahlung. Der Kern $R(x'-x)$ des Integraloperators wird Apparate-Funktion (in der optischen Spektroskopie) oder Response-Funktion (in der Spektroskopie der Kernstrahlungen) genannt; er beschreibt, wie durch die Wechselwirkung der Strahlung $f(x')$ mit der Meß-Apparatur die beobachtete Verteilung $g(x)$ erzeugt wird, - d. h. er beschreibt die Abbildung von $f(x')$ in $g(x)$.

Die Apparate-Funktion (oder das Apparate-Profil) kann experimentell bestimmt werden, wenn geeignete Strahler existieren mit einem sehr schmalen Strahlungsprofil, d. h. mit sehr schmaler Linienstrahlung. Kann man diese Linienstrahlung durch eine δ -Funktion beschreiben

$$f(x') = \delta(x' - x_0) \quad (2)$$

dann erhält man mittels Gl (1)

$$g(x) = R(x_0 - x) \quad (3)$$

d. h. die Apparate-Funktion in der Umgebung von x_0 .

In der Spektroskopie besteht die Aufgabe, bei bekannter Apparate- oder Response-Funktion $R(x'-x)$ aus der gemessenen Verteilung $g(x)$ die wahre Strahlungsverteilung $f(x')$ zu berechnen. Wie gut, d. h. mit welcher Genauigkeit das gelingt, hängt ab von

- der Güte der Messung bezüglich $g(x)$,
- der Genauigkeit der Kenntnis von $R(x'-x)$ und
- der mathematischen Behandlung der Gl (1).

In der optischen Spektroskopie sind die x und x' in Gl (1) gleichartige physikalische Größen. Die x' sind Energien, die x sind entweder Wellenlängen oder Frequenzen, die über $E = h \cdot \nu = h \cdot c / \lambda$ unmittelbar mit der Energie verknüpft sind.

In der Spektroskopie von Kernstrahlungen (Neutronen, Protonen, harten γ -Strahlungen usw.) sind die Zusammenhänge erheblich komplizierter. Hier beschreibt $f(x')$ die Energie-Verteilung der Primär-Strahlung, d. h. x' ist eine Energie; $g(x)$ ist (häufig) die Impulshöhenverteilung in einem Viel-Kanalanalysator, der die unterschiedlich hohen Impulse eines "Proportional-Zählers" (im allgemeinsten Sinne verstanden) registriert. Es ist dann $g(x)$ keine stetige Funktion; x repräsentiert die Nummer eines Kanals des Analysators (z. B. die Zahl i), dem durch eine geeignete Eichung eine bestimmte Energie zugeordnet wird; $g(x)$ oder $z(i)$ ist die Zählrate, d. h. die Anzahl der Impulse im Kanal i .

In der Spektroskopie von Kernstrahlungen ist auch der Kern $R(x'-x)$ des Integraloperators in Gl (1) (die "Response"-Funktion) begrifflich umfassender als die "Apparate"-Funktion der optischen Spektroskopie. Während die Apparate-Funktion allein die Wechselwirkung zwischen Strahlung und Meßapparatur (Spektrometer) beschreibt, was im wesentlichen nur eine "Verzerrung" des Profils der emittierten Strahlung bedeutet (UNSÖLD [1]), enthält die Response-Funktion

- die Wechselwirkung der Kernstrahlung mit anderer Materie, im wesentlichen also Ionisationseffekte (Neutronen erzeugen in einem H_2 -gefüllten Proportionalzähler durch Stoß Protonen mit einem breiten Energiespektrum),
- die Wechselwirkung der Ionen und Elektronen mit dem Zähler,
- die Wirkungsweise des Impulshöhen-Analysators.

Damit entsteht meßtechnisch ein zusätzliches Problem. Die mit dem Impulshöhen-Analysator gemessene spektrale Verteilung $g(x)$ bzw. $z(i)$ ist die "Abbildung" der Strahlungs- bzw. Energieverteilung $f(x')$, wie sie im Bereich des Zählers vorliegt. Nur dann, wenn die Strahlung zwischen dem Ort der Emission (dem Strahler) und dem Ort der Messung (des Zählers) keine qualitative Änderung durch Wechselwirkung mit anderer Materie erfahren hat, kann auf die wahre Verteilung der Strahlung am Ort der Emission geschlossen werden. Man kann aber im allgemeinen allein aus den Meßwerten, also aus den Zählraten $z(i)$, nicht beurteilen, ob diese Voraussetzung erfüllt ist. Das trifft in vollem Umfange auf die Neutronen-Spektroskopie zu und spielt insbesondere bei der Untersuchung des Linienprofils von Neutronenstrahlen eine erhebliche Rolle. Ein Auswerteprogramm muß diesem Sachverhalt Rechnung tragen.

Apparate-Profile lassen sich meist durch relativ einfache Funktionen hinreichend gut approximieren (etwa durch Gauß-, Dispersions- oder Voigt-Profile); das ist bei Response-Funktionen praktisch nie der Fall. Es sind deshalb die gut ausgearbeiteten Methoden der optischen Spektroskopie auf die Spektroskopie von Kernstrahlungen kaum anwendbar.

Im folgenden wird gezeigt, wie man mit der Methode der kleinsten Quadrate (im Falle der Linienstrahlung) beziehungsweise mittels quadratischer Optimierung (im Falle der Kontinuumsstrahlung) die Spektren von Kernstrahlungen entfalten, also die Funktion $f(x')$ aus Gl (1) hinreichend genau berechnen kann. Dabei sollen die folgenden Punkte berücksichtigt werden; es soll möglich sein:

- a) Kontinuum- und Linien-Strahlung zu untersuchen und bei Vorliegen von Linienstrahlung die oben genannte Voraussetzung zu prüfen, daß diese auf dem Wege zwischen ihrer Emission und der Messung in ihrer Struktur nicht verändert wurde,
- b) eine Aussage über die Güte der Messung zu machen,
- c) das Programm auf einem kleineren Prozeßrechner zu installieren, der zusammen mit der Meßapparatur einen selbständigen, mobilen Meßplatz bildet.

2. Entfaltung von Spektren nach der Methode der kleinsten Quadrate

2.1 Die Ausgangsgleichung

Die Integralgleichung Gl (1) kann bekanntlich folgendermaßen approximiert werden: Man denkt sich den Bereich x' der Strahlung zerlegt in NR Intervalle mit den Mittelpunkten $x_r(k)$, $k = 1, \dots, NR$. Jedem $x_r(k)$ ordnet man eine Strahlungsstärke $s(k)$ zu, die die Intensität der Strahlung in dem betreffenden Intervall repräsentiert. Diese Zerlegung ist so vorzunehmen, daß durch $x_r(1), \dots, x_r(NR)$ das gesamte Intervall abgedeckt wird, in dem die Strahlung von Null verschieden ist. Für jedes x' außerhalb des Bereichs $[x_r(1), x_r(NR)]$ ist die Strahlungsstärke Null. Bei äquidistanten "Referenz"-Linien $x_r(k)$ ist die Länge $\Delta x = x_r(k) - x_r(k-1)$ für alle Intervalle gleich, und für

$$x_r(k) - \Delta x/2 \leq x' \leq x_r(k) + \Delta x/2 \quad (4)$$

gilt näherungsweise

$$f(x') = \Delta x \cdot s(k) \quad (5)$$

Die Güte dieser Näherung ist natürlich umso besser, je größer NR oder je kleiner Δx ist. Da Δx eine Konstante ist, kann sie in die $s(k)$ hineingezogen werden, was von hier ab auch geschehen soll. Das hat man dann aber am Ende der Auswertung zu berücksichtigen.

Jede dieser Referenzlinien $x_r(k)$ hat einen Anteil $z_k(i)$ an den gemessenen Zählraten $z(i)$:

$$z_k(i) = R(i,k) \cdot s(k) \quad (6)$$

Es folgt damit für Gl (1):

$$z(i) = \sum_k z_k(i) = \sum_k R(i,k) \cdot s(k) \quad (7)$$

wobei der Index i die Werte 1 bis IE durchläuft. Die $IE \cdot NR$ - Matrix $R(i,k)$, die sogenannte "Response-Matrix", entspricht dem Kern $R(x-x')$ des Integraloperators in Gl (1). Für sehr große NR und IE geht Gl (7) in Gl (1) über. Bei gegebenen $z(i)$ und $R(i,k)$ besteht nun die Aufgabe, aus den Gln (7) die $s(k)$ zu bestimmen. Dabei ist zu berücksichtigen, daß die $z(i)$ mit Fehlern oder statistischen Schwankungen behaftete, diskrete Meßwerte sind.

Es ist deshalb nicht angebracht, $NR = IE$ zu wählen, also die Anzahl der Referenzlinien so groß zu nehmen, daß jede Referenzlinie $x_r(k)$ einer Kanalnummer i entspricht. Dann bilden zwar die Gln (7) ein vollständiges System von NR Gleichungen mit ebensovielen Unbekannten, doch schlägt hierbei jede Schwankung in jeder der Zählraten $z(i)$ unmittelbar auf die Lösung durch, was zu nicht mehr überschaubaren Resultaten führt.

Bei den Auswerteprogrammen, die teilweise zwei bis drei Jahrzehnte alt sind oder doch zu einer Zeit konzipiert wurden, als noch nicht auf so leistungsstarke Rechner zurückgegriffen werden konnte, wird wesentlich der folgende, umgekehrte Weg gegangen: Es werden jeweils mehrere Kanäle zu Gruppen so zusammengefaßt, daß ihre Anzahl gleich ist der Anzahl NR der Referenzlinien. Diese Gruppenbildung wird nicht willkürlich durchgeführt. Jeder Zähler hat ein gewisses Auflösungsvermögen ("Resolution"), - in der Größenordnung 2 - 5 % der Energie. Es ist dann naheliegend, die Auswertung auf 20 bis 50 Gruppen zu beschränken, - und jedenfalls nicht Genauigkeiten vorzugeben, die durch das begrenzte Auflösungsvermögen nicht mehr begründbar sind. Damit findet zugleich die Wahl für die Anzahl NR der

Gruppen ihre Rechtfertigung. Das so erzeugte vollständige System von linearen Gleichungen ist relativ stabil gegenüber Schwankungen der einzelnen Zählraten, wobei für die Lösung dieser Gleichungen häufig noch spezifische Verfahren entwickelt wurden, die den Besonderheiten dieser Gleichungssysteme Rechnung tragen. Hierauf soll nicht näher eingegangen werden, doch erscheinen einige Bemerkungen angebracht:

- Soweit Strahlungsfelder mit hoher zeitlicher Konstanz auszumessen sind, ist die Anwendung solcher Auswerteverfahren problemlos. Durch hinreichend lange Meßzeiten lassen sich die statistischen Schwankungen in den Zählraten fast beliebig reduzieren; diese Art der Auswertung führt dann zu guten Ergebnissen. Allerdings treten mitunter auch negative Strahlungsstärken auf.
- Die Genauigkeitsanforderungen an solche Messungen sind nicht extrem hoch; in vielen Fällen reicht es aus, die Größenordnung der Flußdichte zu kennen.
- Genauigkeitsaussagen sind nur bedingt oder indirekt mit Hilfe von Eichungen oder geeigneten Vergleichsmessungen möglich.
- Zur Ausmessung von Linienprofilen wurden solche Zähler bisher anscheinend nicht verwendet; - sie waren dafür auch nicht konzipiert.

Die Anwendung solcher Zähler in der Plasmaphysik zur Ausmessung des durch den Doppler-Effekt verbreiteten Linienprofils von Neutronenstrahlen, d. h. zur Bestimmung der Plasmatemperatur im keV-Bereich, erhöht die Genauigkeitsanforderungen an die Messungen und an die Auswertung ganz erheblich, denn

- die Meßzeit ist hierbei mit nur ca. 1 Sekunde extrem kurz, die statistischen Schwankungen in den Zählraten sind deshalb sehr groß, und
- die Linienverbreiterung liegt in der Größenordnung des Auflösungsvermögens des Zählers.

Es erscheint deshalb sinnvoll, die $s(k)$ aus der Forderung

$$\sum_{i=1}^{IE} \left\{ z(i) - \sum_{k=1}^{NR} R(i,k) \cdot s(k) \right\}^2 = \Phi = \text{Minimum!} \quad (8)$$

zu bestimmen, wobei NR zwar kleiner als IE ist, aber nicht notwendig durch das Auflösungsvermögen festgelegt wird. Dieses Verfahren erlaubt eo ipso eine Genauigkeitsaussage über die Ergebnisse, also auch eine Entscheidung

darüber, ob Messungen brauchbar sind und ob das Meßverfahren der Aufgabenstellung - gedacht wird hier speziell an die Bestimmung der Plasmatemperatur aus der Doppler-Verbreiterung des Linienprofils der 2,45 MeV Neutronenstrahlung - angemessen ist.

Mit Gl (8) ist das Problem noch nicht vollständig beschrieben. Für die Kontinuumsstrahlung muß zusätzlich gefordert werden, daß für alle k gilt:

$$s(k) \geq 0 \quad (9)$$

Im Falle der Linienstrahlung müssen die $s(k)$ das Linienprofil beschreiben, das hier die Form einer Gauß-Kurve haben soll:

$$s(k) = q(1) \cdot e^{-q(2) \cdot (xr(k) - q(3))^2} \quad (10)$$

mit $q(3) = 2,45$ MeV. Diese spezielle Form für die $s(k)$ wird allerdings im weiteren nicht benötigt. Es reicht die Aussage, daß die $s(k)$ in vorgegebener Weise von einem Satz von Parametern beziehungsweise von einem Vektor $q = q(1), \dots, q(M)$ mit $M < NR$ abhängen:

$$s(k) = s(k; q) \quad (11)$$

Diese Forderungen (9) und (11) gestatten es nicht, die übliche Methode zur Berechnung der $s(k)$ anzuwenden, die bekanntlich darin besteht, in der Gl (8) Φ partiell nach den unbekannten, hier variablen $s(k)$ zu differenzieren und so ein vollständiges System linearer Gleichungen für die $s(k)$ zu erzeugen. Dieses Verfahren würde wesentlich nur auf die oben bereits als unzureichend erkannten Wege führen und beispielsweise negative Strahlungsstärken $s(k)$ nicht zwangsläufig verhindern.

Im nächsten Abschnitt 2.2 wird gezeigt, wie das Spektrum einer Linienstrahlung entfaltet werden kann; im Abschnitt 2.3 wird die Kontinuumsstrahlung behandelt.

Vorher soll die Problematik anhand von zwei sehr unterschiedlichen Messungen kurz dargestellt werden. Die folgenden Bilder enthalten oben jeweils die Darstellung der gemessenen Zählraten über den Kanal-Nummern des Impulshöhen-Analysators.¹ In den Fig. 1 und Fig. 2 erkennt man bei der

¹ Die Kurven sind auf 1 normiert. Die Maximalwerte sind auf den Bildern angegeben.

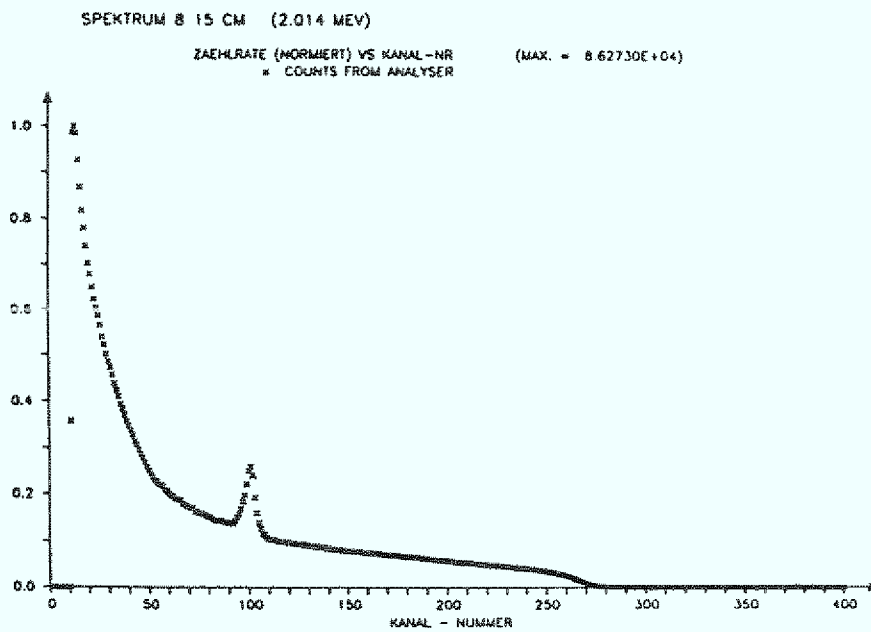


Fig. 1a: Gemessene Zählraten vs. Kanalnummern

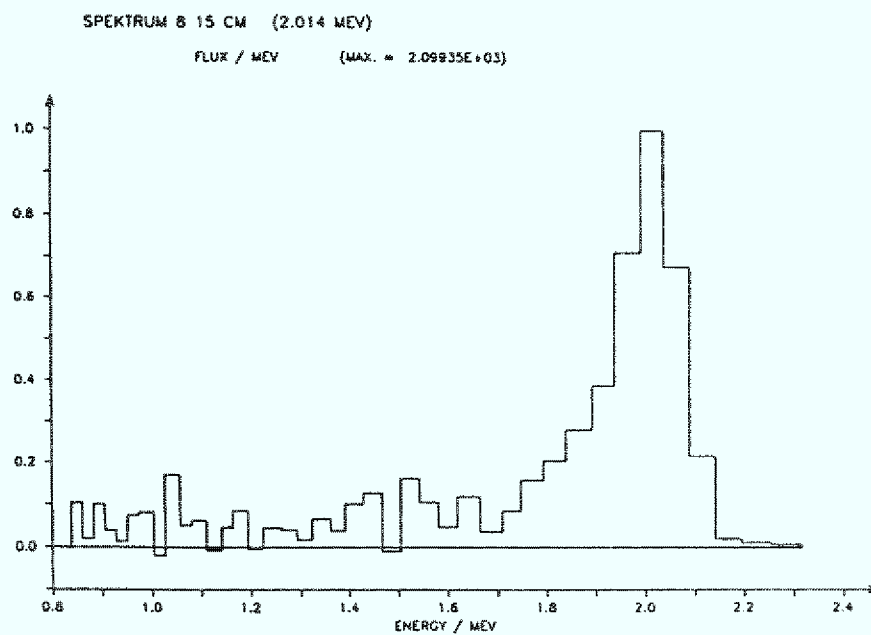


Fig. 1b: Neutronenspektrum aus den gemessenen Zählraten
(Kanäle 112 bis 306)

Fig. 1: Neutronenspektrum aus den gemessenen Zählraten nach [3] berechnet
(Langzeit-Messung)

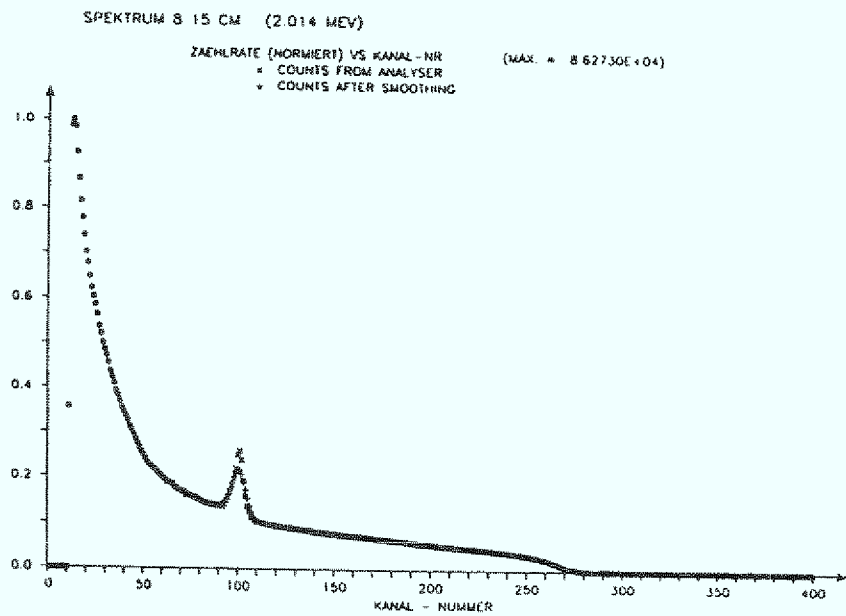


Fig. 2a: Gemessene und geglättete Zählraten vs. Kanalnummern

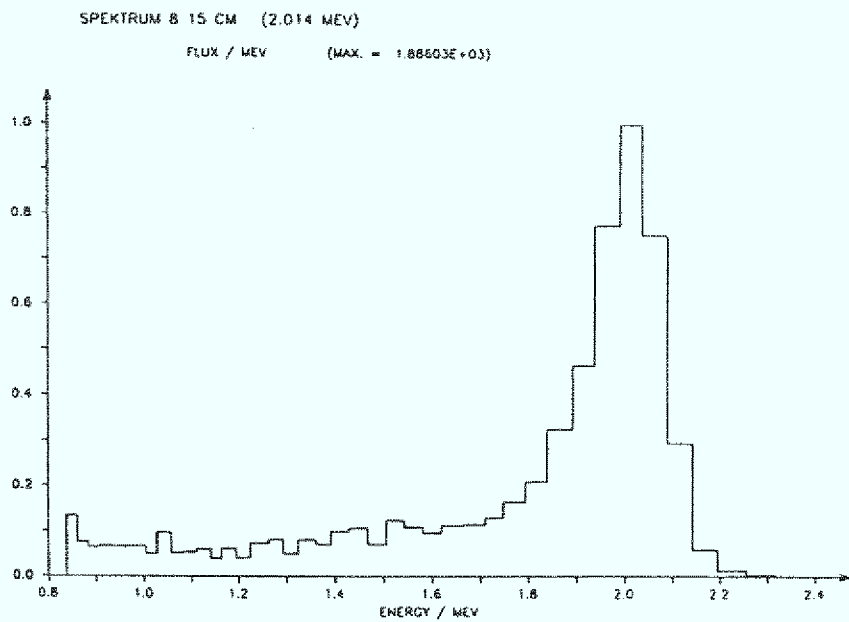


Fig. 2b: Neutronenspektrum aus den geglätteten Zählraten
(Kanäle 112 bis 306)

Fig. 2: Neutronenspektrum aus den geglätteten Zählraten nach [3] berechnet
(Langzeit-Messung)

Kanal-Nr. 100 einen Eich-Peak, der von einer 0,65 MeV α -Quelle stammt und die Zuordnung Kanal-Nr. $\Leftrightarrow$ Energie gestattet (diese Zuordnung wird beispielsweise bei der Konstruktion der Response-Matrix $R(i,k)$ benötigt). Bei den Fig. 3 und 4 verschwindet dieser Peak in den statistischen Schwankungen der Zählraten. Für die Auswertung können - aus hier nicht abzuhandelnden Gründen - nur die Kanäle oberhalb dieses Peaks, also ab etwa 110 oder 120 verwendet werden, - in Fig. 1 und 2 bis etwa Kanal-Nr. 280, in Fig. 3 und 4 bis etwa Kanal-Nr. 370. Die unteren Bilder stellen jeweils das zugehörige, nach BENJAMIN, KEMSHALL und BRISTOCK [3] entfaltete Neutronen-Spektrum dar;¹ es bedeutet

$$\text{FLUX} / \text{MEV} = \text{Anzahl der Neutronen} / (\text{cm}^2 \cdot \text{sec} \cdot \text{MeV})$$

Das Spektrum in Fig. 1 zeigt im Bereich von 0,85 bis 1,7 MeV einen sehr unruhigen Verlauf und einige, wenn auch außerordentlich kleine, negative Werte.

In Fig. 2 wurden die Zählraten vor der Entfaltung geglättet ("Counts after smoothing"). Der Unterschied zwischen den gemessenen und den geglätteten Zählraten ist hier sehr gering; er ist auf dem Bild praktisch nicht zu sehen. Dadurch bekommt das Spektrum einen ruhigeren, glatteren Verlauf, der vom physikalischen Standpunkt mehr befriedigt. Ob und wie weit eine solche Manipulation der Zählraten zu rechtfertigen ist, soll und kann hier nicht diskutiert werden. Es ist aber bemerkenswert, wie stark eine so geringe - wenn auch systematische und alle Zählraten betreffende - Manipulation der Zählraten das Ergebnis beeinflusst. Der Unterschied zwischen den Maximalwerten der Flüsse (2099 in Fig. 1 und 1886 in Fig. 2) ist für die Praxis erträglich. - Die Beobachtungsdauer betrug hierbei 2500 sec, die maximale Zählrate lag bei etwa 86000.

Völlig anders waren die Meßbedingungen für die Fig. 3 und 4. Die Meßzeit betrug nur 1 sec, die maximale Zählrate lag bei 440. Die Streuung der auszuwertenden Zählraten für die Kanäle 120 bis 350 ist außerordentlich groß (Fig. 3), die Glättung hat einen erheblichen Einfluß (Fig. 4). Das Spektrum in Fig. 3 ist schlicht unbrauchbar; auch das von Fig. 4 hat noch beachtliche negative Werte, deutet aber - wie es sein muß - ein Maximum zwischen 2,4 und 2,5 MeV an. Interessanter Weise unterscheiden sich auch hier die Maximalwerte der Flüsse (20259 in Fig. 3 und 21588 in Fig. 4) relativ wenig.

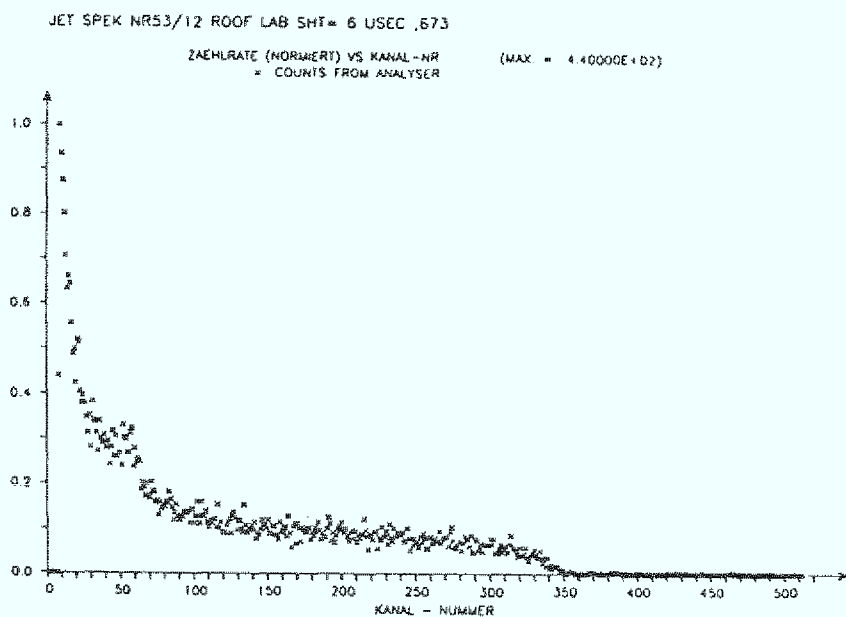


Fig. 3a: Gemessene Zählraten vs. Kanalnummern

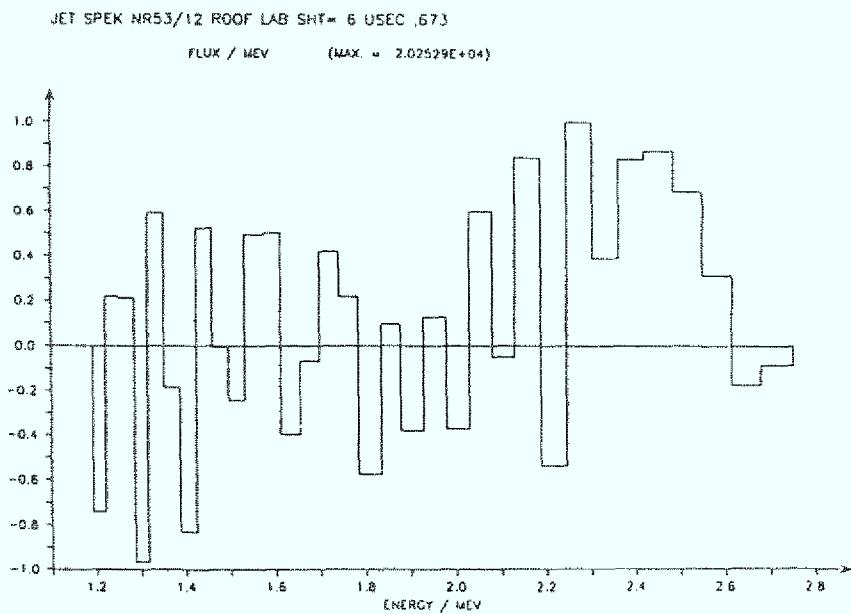


Fig. 3b: Neutronenspektrum aus den gemessenen Zählraten
(Kanäle 167 bis 382)

Fig. 3: Neutronenspektrum aus den gemessenen Zählraten nach [3] berechnet
(Kurzzeit-Messung)

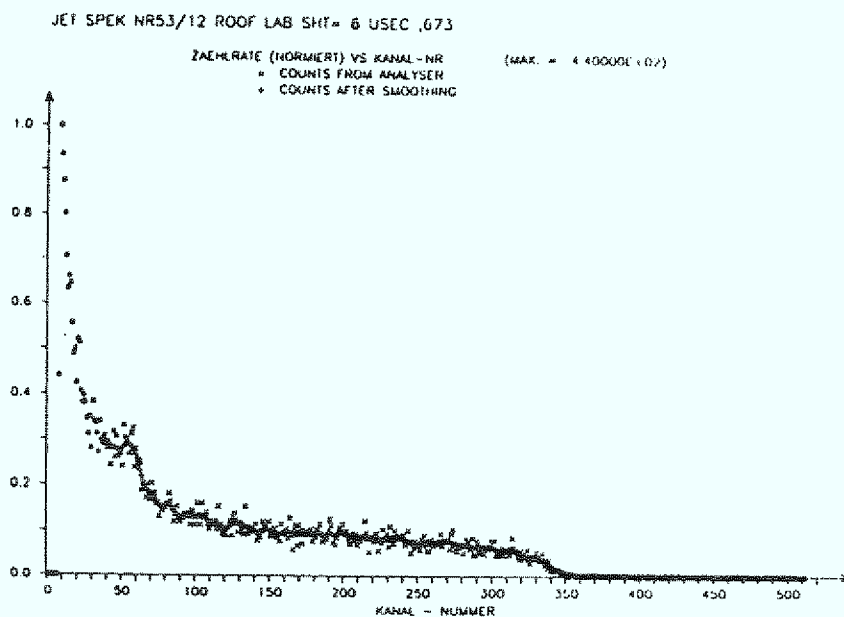


Fig. 4a: Gemessene und geglättete Zählraten vs. Kanalnummern

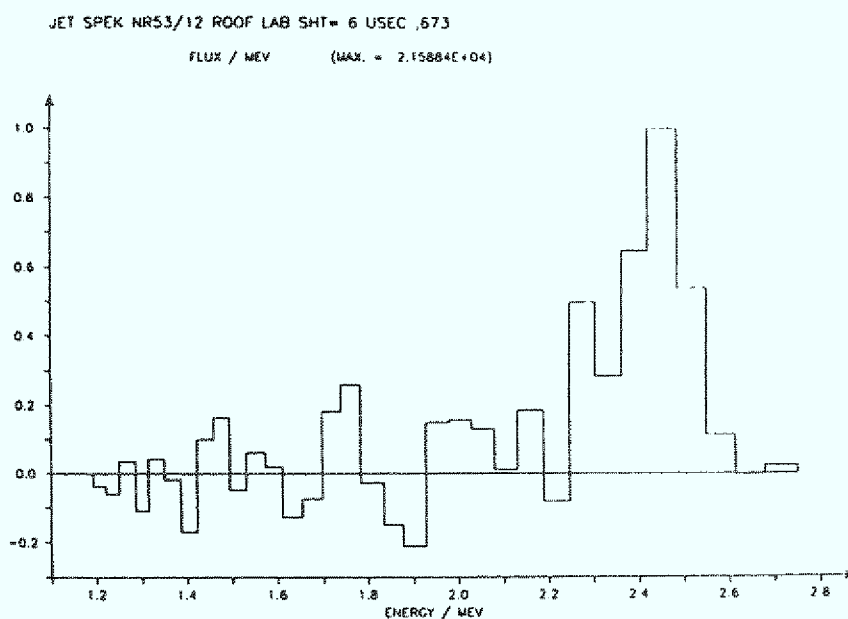


Fig. 4b: Neutronenspektrum aus den geglätteten Zählraten
(Kanäle 167 bis 382)

Fig. 4: Neutronenspektrum aus den geglätteten Zählraten nach [3] berechnet
(Kurzzeit-Messung)

Der Unterschied zwischen diesen beiden Messungen, also zwischen den Fig. 1 und 2 einerseits und Fig. 3 und 4 andererseits, kann in sehr grober Weise quantitativ dargestellt werden. So beträgt beispielsweise das aus den größten Zählraten 86000 und 440 gebildete Verhältnis 195. Man kann auch das Produkt aus Meßzeit und maximalem Neutronenfluß zur Charakterisierung heranziehen; es ist im ersten Falle um etwa den Faktor 250 größer, also günstiger, als im zweiten Falle. Welche Vergleichsgröße man auch nimmt, - man kann nicht erwarten, die Verhältnisse durch die Verlängerung der Meßzeit um einige Sekunden wesentlich zu verbessern.

An eine Bestimmung der Halbwertsbreite des Profils der 2,45 MeV Neutronenstrahlung ist hierbei natürlich nicht zu denken. Diese Aufgabe ist - wenn überhaupt - nur mit kräftigeren mathematischen Hilfsmitteln zu lösen. Dazu sollen die nächsten Abschnitte einen Beitrag liefern.

2.2 Linienstrahlung

Von einer Linienstrahlung wird im Rahmen dieser Darlegungen dann gesprochen, wenn die nach Gl (1) gesuchte Funktion $f(x')$ bereits *qualitativ* bekannt, also ihre *Struktur* vorgegeben ist und die Lösung von Gl (1) nur noch darin besteht, die Werte der in $f(x')$ eingehenden Konstanten oder Parameter zu bestimmen. Im Falle der Gl (10) sind das die Größen $q(1)$, $q(2)$ und $q(3)$. In diesem Sinne liegt auch dann eine Linienstrahlung vor, wenn sich die Funktion $f(x')$ durch Addition oder Überlagerung von mehreren solcher, in ihrer Struktur bekannter Funktionen darstellt.

Bei der Linienstrahlung sind zwei Fälle zu unterscheiden:

- (1) Es kann sein, daß sich in Gl (1) das Integral über x' ausrechnen und geschlossen darstellen läßt, - etwa als $F(x; \alpha, \beta, \gamma \dots)$ mit den Parametern α , β , $\gamma \dots$
- (2) Das Integral in Gl (1) läßt sich nicht ausrechnen, nicht in geschlossener Form darstellen.

Der zweite Fall ist offensichtlich von allgemeinerer Art; er soll hier behandelt werden. Der erste Fall ist, wie man aus den folgenden Ableitungen unmittelbar ersieht, der Spezialfall mit nur einer Referenzlinie. Er ist bei der Entfaltung von Spektren einfacher zu handhaben und führt selbst

bei erheblichen statistischen Schwankungen in den Zählraten noch zu brauchbaren Ergebnissen. Hierauf wird in Abschnitt 3.4.3 noch eingegangen.

Zur Vereinfachung der Schreibweise soll gelten:

- (a) Die Summe über i wird durch eine eckige Klammer dargestellt

$$\sum_i \dots \equiv [\dots] \quad (12a)$$

- (b) Über Indizes, die in einem Produkt zweimal auftreten, wird summiert (EINSTEIN-Konvention); es ist beispielsweise

$$R(i,k) \cdot s(k) \equiv \sum_k R(i,k) \cdot s(k) \quad (12b)$$

- (c) Die partielle Ableitung einer Funktion (etwa F) nach einer ihrer Argumente (etwa $x(k)$) wird durch Tiefsetzen dieser Variablen angezeigt

$$F_{x(k)} \equiv \partial F / \partial x(k) \quad (12c)$$

- (d) Ein Vektor wird durch Fettdruck dargestellt, z. B. $\mathbf{q}$, und es ist die Differenz zweier Vektoren $\mathbf{q}(1)$, $\mathbf{q}(2)$

$$\Delta \mathbf{q} = \mathbf{q}(2) - \mathbf{q}(1) \quad (12d)$$

Damit kann man für Gl (8) schreiben

$$[(z(i) - R(i,k) \cdot s(k))^2] = \Phi = \text{Minimum!} \quad (13)$$

oder, wenn man die IE (Hilfs-) Funktionen $F \equiv F(i)$

$$F = R(i,k) \cdot s(k) \quad (14)$$

eingührt,

$$[(z(i) - F)^2] = \Phi = \text{Minimum!} \quad (15)$$

Im Falle der Linienstrahlung hängen die $s(k)$ und damit auch die F in vorgegebener, insbesondere *nicht-linearer* Weise mit den Parametern $q(m)$ zusammen, die das Linienprofil charakterisieren, - Gl (10) oder, allgemeiner, Gl (11). Andererseits müssen sie der Forderung der Gl (13) genügen.

Die Berechnung der $q(m)$ ist ein Problem der nicht-linearen, hier der quadratischen Optimierung [2]; sie wird iterativ durchgeführt. Bei vorgegebenen (Anfangs-) Werten für die $q(m)$ werden die $s(k)$ und infolge dessen

auch die $F = F(\mathbf{q})$ zu Konstanten, und $\Phi = \Phi(\mathbf{q})$ bekommt einen Wert, der im allgemeinen nicht minimal ist, also der Forderung der Gl (13) oder Gl (15) nicht genügt.

Hinreichend kleinen Änderungen der $q(m)$ um $\Delta q(m)$ beziehungsweise des Vektors $\mathbf{q}$ um $\Delta \mathbf{q}$ entspricht eine kleine Änderung der F

$$F(\mathbf{q} + \Delta \mathbf{q}) = F(\mathbf{q}) + F_{q(m)} \cdot \Delta q(m) \quad (16)$$

$$= F + F_{s(k)} \cdot s(k)_{q(m)} \cdot \Delta q(m) \quad (16a)$$

$$= F + R(i,k) \cdot s(k)_{q(m)} \cdot \Delta q(m) \quad (16b)$$

Die Ableitungen von F nach den $q(m)$ beziehungsweise nach den $s(k)$ und die Ableitungen der $s(k)$ nach den $q(m)$ sind für die Anfangswerte $\mathbf{q}$ zu bilden; es ist ferner $F = F(\mathbf{q})$. Alle diese Größen haben feste Werte, - lediglich über die $\Delta q(m)$ kann noch verfügt werden.

Geht man mit Gl (16b) in Gl (13) ein, dann erhält man

$$\Phi(\mathbf{q} + \Delta \mathbf{q}) = [(z(i) - F - R(i,k) \cdot s(k)_{q(m)} \cdot \Delta q(m))^2] = \text{Minimum!} \quad (17)$$

Die Funktion Φ enthält nur noch die $\Delta q(m)$ als Variable. Im Minimum verschwinden die partiellen Ableitungen von Φ nach den $\Delta q(m)$. Indem man diese Funktion nach allen $\Delta q(m)$ differenziert, erhält man also ein System von M linearen Gleichungen für die M unbekannten $\Delta q(m)$.

Bevor diese Prozedur durchgeführt wird, muß darauf hingewiesen werden, daß mit der Berechnung der $\Delta q(m)$ das Problem noch nicht gelöst ist. Die Gln (16-16b) und (17) haben, wie oben bereits vermerkt, "hinreichend kleine Änderungen" der $\Delta q(m)$ zur Voraussetzung. Das bedeutet, daß für vorgegebene, sehr kleine positive ε und ε' gelten muß

$$| \Delta q(m) | \leq \varepsilon \cdot | q(m) | \quad (18)$$

und

$$| \Phi(\mathbf{q}) - \Phi(\mathbf{q} + \Delta \mathbf{q}) | \leq \varepsilon' \cdot \Phi(\mathbf{q}) \quad (19)$$

Außerdem ist natürlich zu fordern

$$\Phi(\mathbf{q} + \Delta \mathbf{q}) \leq \Phi(\mathbf{q}) \quad (20)$$

Diese Voraussetzungen sind im allgemeinen nicht erfüllt; insbesondere ist die Bedingung (18) fast immer verletzt, die Beträge der berechneten $\Delta q(m)$ sind zu groß, - jedenfalls zu Beginn des Iterationsprozesses. Man kann die

Erfüllung der Bedingung (18) dadurch erzwingen, daß man den größten auftretenden Wert von $|\Delta q(m)/q(m)|$ bestimmt

$$C = \max (|\Delta q(m)/q(m)|) \quad (21)$$

und, falls $C > \varepsilon$, alle $\Delta q(m)$ mit ε/C multipliziert.

Analog ist zu verfahren, wenn Bedingung (19) verletzt ist. Auch in diesem Falle sind die $\Delta q(m)$ entsprechend zu verkleinern.

Wenn die Bedingung (20) verletzt, wenn also $\dot{\Phi}(q + \Delta q) > \dot{\Phi}(q)$ ist, dann sind die Vorzeichen aller $\Delta q(m)$ umzudrehen.

Die partiellen Ableitungen von Φ in Gl (17) nach den $\Delta q(m)$ sind im Minimum von Φ alle gleich Null. Die Ableitung von Φ nach den $\Delta q(m)$ für alle m von 1 bis M ergibt deshalb ein System von M inhomogenen Gleichungen zur Bestimmung der M unbekannten $\Delta q(m)$:

$$[(z(i) - F - R(i,k) \cdot s(k)_{q(m)} \cdot \Delta q(m)) \cdot R(i,j) \cdot s(j)_{q(n)}] = 0 \quad (22)$$

mit n von 1 bis M .

Hierzu sind vielleicht zwei Hinweise nützlich:

- Die Summen über k und j sind miteinander zu multiplizieren; durch die unterschiedlichen Indizes k und j werden Mißverständnisse bei der Multiplikation vermieden.
- Die Ableitung erfolgte formal nach den $\Delta q(n)$, nicht nach den $\Delta q(m)$; beide Indizes durchlaufen die Werte von 1 bis M . Diese Unterscheidung ist jedoch wesentlich, denn m ist in jeder der M Gleichungen Laufindex, aber es wird in der 1. Gleichung nach $\Delta q(1)$, in der 2. Gleichung nach $\Delta q(2)$ usw. differenziert.

Zur Berechnung der $\Delta q(m)$ wird das Gleichungssystem (22) auf die Form gebracht

$$A \cdot \Delta q = b \quad (23)$$

wo A die Matrix des Gleichungssystems, b der (Spalten-) Vektor der rechten Seite mit den Elementen $b(n)$ und Δq der (Spalten-) Vektor der unbekannten $\Delta q(m)$ bedeuten. Dabei wird eine Darstellung der A und b angestrebt, die auf zeitsparende Weise eine häufige Wiederholung der Berechnung der $\Delta q(m)$ gestattet, was - wie oben bereits erläutert - wegen des iterativen Charakters dieses Lösungsverfahrens zweckmäßig ist.

Für die $b(n)$ folgt aus Gl (22)

$$b(n) = [(z(i) - F) \cdot R(i,j) \cdot s(j)]_{q(n)} \quad (24)$$

Bedenkt man, daß für eine Messung die $z(i)$ und die $R(i,k)$ feste Werte besitzen, die sich während des Iterationsprozesses nicht verändern, dann ist es sinnvoll, einen Vektor oder ein Array $P(j)$ der folgenden Form zu definieren

$$P(j) = [z(i) \cdot R(i,j)] \quad (25)$$

Aus demselben Grunde wird eine Matrix $G(k,j)$ definiert

$$G(k,j) = [R(i,k) \cdot R(i,j)] \quad (26)$$

Hier gilt offensichtlich

$$G(k,j) = G(j,k) \quad (27)$$

Diese Matrix ist symmetrisch. (Das erlaubt eine Speicherplatz sparende Programmierung, wenn nur die untere beziehungsweise obere Dreiecksmatrix verwendet wird. Darauf soll hier nicht weiter eingegangen werden.)

Es folgt damit aus Gl (24) für $n = 1, \dots, M$

$$b(n) = (P(j) - G(k,j) \cdot s(k)) \cdot s(j)_{q(n)} \quad (28)$$

Analog erhält man aus Gl (22) für die Matrixelemente $A(n,m)$

$$\begin{aligned} A(n,m) &= [R(i,k) \cdot s(k)_{q(m)} \cdot R(i,j) \cdot s(j)_{q(n)}] \\ &= G(k,j) \cdot s(k)_{q(m)} \cdot s(j)_{q(n)} \end{aligned} \quad (29)$$

Die Rechnung kann bei Verwendung der Matrix- bzw. Vektor-Schreibweise in Kürze wie folgt zusammengefaßt werden:

Sei R die $IE \cdot NR$ -dimensionale Response-Matrix, s der NR -dimensionale Spaltenvektor der Strahlungsstärken, z der IE -dimensionale Spaltenvektor der Zählraten, dann soll gelten

$$R \cdot s = z \quad (30)$$

Mit der zu R transponierten Matrix R^t folgt daraus

$$R^t \cdot R \cdot s = R^t \cdot z \quad (30a)$$

Unter Verwendung der $NR \cdot NR$ -Matrix G nach Gl (26), also

$$G = R^t \cdot R \quad (30b)$$

und dem NR -dimensionalen Vektor P nach Gl (25), also

$$P = R^t \cdot z \quad (30c)$$

gilt für Gl (30a)

$$G \cdot s = P \quad (30d)$$

Der Lösungsvektor s soll einerseits der Forderung Gl (8) genügen, andererseits von einem Vektor q mit $q(m)$, $m=1, \dots, M$ abhängen. Für beliebig vorgegebene Anfangswerte von q erfüllt s die erste Forderung sicher nicht. Mit der aus den partiellen Ableitungen der $s(k)$ nach den $q(m)$ gebildeten $NR \cdot M$ -Matrix

$$S = [S(k,m)] = [s(k)_{q(m)}] \quad (30e)$$

erhält man einen Vektor s' , der sich nur wenig von s unterscheidet (die Differenz zwischen beiden Vektoren soll so klein sein, daß die Taylor-Entwicklung mit dem in $\Delta q(m)$ linearen Term abgebrochen werden kann):

$$s' = s + S \cdot \Delta q \quad (30f)$$

Geht man damit für s in Gl (30d) ein, so folgt

$$G \cdot (s + S \cdot \Delta q) = P \quad (30g)$$

oder, da $G \cdot s$ nach Vorgabe von s bekannt ist,

$$G \cdot S \cdot \Delta q = P - G \cdot s \quad (30h)$$

Für $M < NR$ ist $G \cdot S$ eine $NR \cdot M$ -Matrix; Gl (30h) beschreibt ein überbestimmtes System aus NR Gleichungen für die M Unbekannten $\Delta q(m)$. Die linksseitige Multiplikation mit S^t macht daraus ein System aus M Gleichungen für die M Unbekannten in der Form der Gl (23) mit

$$A = S^t \cdot (G \cdot S) \quad (30i)$$

und

$$\mathbf{b} = \mathbf{S}^t \cdot (\mathbf{P} - \mathbf{G} \cdot \mathbf{s}) \quad (30k)$$

Schreibt man hier die Elemente der Matrizen $\mathbf{G}$ und $\mathbf{S}$ und der Vektoren $\mathbf{P}$ und $\mathbf{s}$ explizit an, dann ergeben sich unmittelbar die Elemente von $\mathbf{A}$ und $\mathbf{b}$ gemäß Gl (29) und Gl (28).

Die $\Delta q(m)$ müssen den Bedingungen (18) bis (20) genügen; sie müssen gegebenenfalls verkleinert werden, und es sind - da ein Minimum von Φ angestrebt wird - gegebenenfalls die Vorzeichen zu korrigieren. Ein weiterer Iterationsschritt beginnt dann wieder mit Gl (30f).

Die Entfaltung eines Linienspektrums läuft in folgender Weise ab:

Schritt 1: Es wird das Raster der Referenzlinien $xr(k)$ festgelegt. Dazu ist die Kenntnis der ungefähren Lage der Linienstrahlung erforderlich. (Gegebenenfalls ist die Strahlung zunächst als Kontinuumstrahlung zu behandeln; dann zeigt sich, für welchen Energiebereich die NR Referenzlinien $xr(k)$ zu wählen sind.) Es werden die $R(i,k)$ und damit gemäß Gl (26) die $G(k,j)$ berechnet.

Schritt 2: Für die Berechnung der $s(k;q)$ und der Ableitungen $s(k)_{q(m)}$ ist ein geeignetes Funktions-Unterprogramm bereitzustellen.

Schritt 3: Die Zählraten $z(i)$ einlesen und auf 1 normieren; also den größten Wert $z_{\max} = \max(z(i))$ bestimmen und alle $z(i)$ durch $z_{\max}$ dividieren. OVERFLOWS treten dann bei der Rechnung nicht auf, UNDERFLOWS können leicht unterdrückt werden.

Schritt 4: Die $P(k)$ nach Gl (25) berechnen.

Schritt 5: Die Anfangswerte für die $q(m)$ festlegen. Hat die zu bestimmende Linie ein Gauß-Profil gemäß Gl (10), dann kann man folgendermaßen vorgehen:

- Man setzt $q(3) = (xr(1) + xr(NR))/2$
- Für $q(2)$ wählt man einen solchen Wert, daß die Halbwertsbreite des Gauß-Profils etwa gleich ist dem halben Energiewert $q(3)$.

- Hat man für $q(1)$ keinen Anhaltspunkt, dann setzt man $q(1) = 1$, bildet damit die $s(k)$ nach Gl (10) und berechnet gemäß Gl (14) die $F = F(i)$ und die Summen über i von $F(i)$ und $z(i)$, also $[F(i)]$ und $[z(i)]$. Ein brauchbarer Anfangswert für $q(1)$ ist $q(1) = [z(i)] / [F(i)]$.

Schritt 6: Damit lassen sich die $b(n)$ nach Gl (28) und die $A(n,m)$ nach Gl (29) bestimmen, und aus dem Gleichungssystem (23) kann man die $\Delta q(m)$ berechnen.

Schritt 7: Sorgt man nun dafür, daß die $\Delta q(m)$ den Bedingungen (18) genügen und mit den Werten $q(m) + \Delta q(m)$ auch die Forderungen (19) und (20) erfüllt sind, dann kann man die $q(m)$ durch die $q(m) + \Delta q(m)$ ersetzen und mit Schritt 6 zu einem neuen Iterationsschritt übergehen.

Schritt 8: Dieser Prozeß wird beendet entweder nach einer vorgegebenen Anzahl von Iterationen oder wenn sich nach einer Iteration das neue Φ (sein Wert sei Φ') nicht oder fast nicht mehr geändert hat, wenn also $(\Phi - \Phi')/\Phi$ kleiner ist als ein vorgegebener kleiner Wert.

2.3 Kontinuum-Strahlung

Die Kontinuum-Strahlung unterscheidet sich ihrem Wesen nach erheblich von der Linien-Strahlung. Das findet auch in der mathematischen Behandlung des Faltungsintegrals Gl (1) seinen Niederschlag.

Es muß zunächst vorausgesetzt werden, daß der Zähler den gesamten Bereich erfaßt, in dem die Zählraten $z(i) > 0$ sind. (Die in den Fig. 1 bis 4 dargestellten Zählraten wären nicht auszuwerten, wenn der Zähler die Zählraten $z(i)$ mit beispielsweise $i > 250$ nicht erfaßt hätte). Da über eine geeignete Eichung die Zuordnung zwischen Kanalnummer und Energie bekannt ist (in Fig. 1 und 2 dient dazu der bei Kanalnummer 100 auftretende Peak der 0,65 MeV α -Strahlung), kann man die Referenzlinie $xr(NR)$, die der größten Energie entspricht, festlegen. Diese Referenzlinie $xr(NR)$ entspricht jedenfalls der Nummer eines Kanals, in dem die Zählrate gleich

Null ist. Diese Kanalnummer heie IE. In den Fig. 1 und 2 ist $IE = 306$, in Fig. 3 und 4 ist $IE = 382$.²

Bei der Wahl der unteren Referenzlinie $xr(1)$ hat man die Eigenschaften des Zhlers zu bercksichtigen (z. B. sein Diskriminierungsvermgen gegenber anderen Strahlungsarten, die zusammen mit der zu messenden Strahlung auftreten) und auch den Gltigkeitsbereich fr die Response-Funktion zu beachten. Natrlich ist auch der Eich-Peak ein Strsignal, das nicht mit ausgewertet werden darf. So definiert die Referenzlinie $xr(1)$ eine Kanalnummer IA, und nur die Zhlraten $z(i)$ mit $IA \leq i \leq IE$ werden fr die Auswertung verwendet. In diesem Sinne ist auch die Summenbildung nach Gl (12a) zu verstehen.

Der Bereich zwischen diesen beiden Referenzlinien wird in quidistante Abschnitte unterteilt. NR hat etwa den Wert 50; die Anzahl der auswertbaren Kanle ist, eine angemessene elektrische und elektronische Einstellung der Meapparatur vorausgesetzt, etwa 200 oder grer, - wie das die Fig. 1 bis 4 zeigen.

Fr die Kanle i und die Referenzlinien $xr(k)$ kann man die Elemente der Response-Matrix $R(i,k)$ und damit $P(k)$ und $G(k,j)$ gem Gl (25) und (26) oder gem Gl (30c) und (30b) berechnen. Sei ferner

$$Z2 = [z(i)^2] \quad (31)$$

die Summe der Quadrate der Zhlraten fr die Kanle IA bis IE. Fr einen vorgegebenen Satz von Anfangswerten $s = s(1), \dots, s(NR)$ ergibt sich dann $\Phi(s)$ nach Gl (8) oder Gl (13) zu

$$\Phi(s) = Z2 - 2 \cdot P(k) \cdot s(k) + G(k,j) \cdot s(k) \cdot s(j) \quad (32)$$

² In der Praxis whlt man natrlich nicht die Zahl IE. Man mu ohnehin eine grobe Vorstellung vom Spektrum haben, also auch von der grten auftretenden Energie $E_{\max}$. Die Kanalnummer IE entspricht einer Energie, die um etwa 5 oder 10 oder 15% grer ist als $E_{\max}$. So sind auch die oben angefuhrten Werte fr IE entstanden. Der Wert IE ist nicht kritisch; er darf natrlich nicht dem ersten Kanal mit $z(i) = 0$ entsprechen, er mu etwas grer sein.

Dieser Wert ist im allgemeinen nicht minimal. Um ihn zu minimieren, müssen die $s(k)$ geeignet verändert werden. Dazu wird untersucht, wie sich $\Phi(s)$ ändert, wenn man eine beliebige Komponente $s(m')$ ersetzt durch³

$$s'(m') = s(m') + \Delta s(m') \quad (33)$$

unter Berücksichtigung der Bedingung

$$s'(m') \geq 0 \quad (34)$$

die man mit $\varepsilon \leq 1$ auch in der Form schreiben kann

$$|\Delta s(m')| \leq \varepsilon \cdot s(m') \quad (34a)$$

Die Lösung, das Minimum von Φ , wird also durch Iteration gewonnen. Dazu ist es zweckmäßig, den Φ -Wert vor und nach der Iteration zu kennen; - man kann dann den Iterationsvorgang beenden, wenn sich diese Werte praktisch nicht mehr voneinander unterscheiden.

Ersetzt man im Vektor s die Komponente $s(m)$ durch $s'(m')$ gemäß Gl (33), dann ergibt die TAYLOR-Entwicklung von Φ nach dieser Komponente, beziehungsweise nach $\Delta s(m')$, einen neuen Wert für $\Phi(s)$, der $\Phi(s')$ heißen soll:

$$\left. \begin{aligned} \Phi(s') &= \Phi(s) - 2 \cdot P(m') \cdot \Delta s(m') \\ &\quad + 2 \cdot G(m', j) \cdot s(j) \cdot \Delta s(m') \\ &\quad + G(m', m') \cdot \Delta s(m') \cdot \Delta s(m') \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

oder, wenn man die stets positive Größe

$$H(m') = G(m', j) \cdot s(j) \quad (36)$$

eingführt,

$$\Phi(s') = \Phi(s) - \Delta s(m') \cdot (2 \cdot (P(m') - H(m')) - G(m', m') \cdot \Delta s(m')) \quad (37)$$

Es soll $\Phi(s') < \Phi(s)$ sein.⁴ Wann das der Fall ist, hängt von $\Delta s(m')$ ab.

³ Die Bezeichnung m' (anstatt m) soll darauf hinweisen, daß m' eine Konstante ist, also kein Index, der der EINSTEINschen Summenkonvention unterliegt.

⁴ Formal richtiger ist $\Phi(s') \leq \Phi(s)$. Wenn $\Phi(s)$ bereits minimal ist, dann kann $\Phi(s')$ natürlich nicht kleiner werden. Während des Iterationsprozesses gilt das Gleichheitszeichen nicht.

Drei Fälle sind zu diskutieren.

1. Fall: $P(m') = H(m')$ (38)

Dann ist

$$\Phi(s') = \Phi(s) + G(m', m') \cdot (\Delta s(m'))^2 \quad (38a)$$

Wegen $G(m', m') \geq 0$ kann $\Phi(s')$ nicht kleiner als $\Phi(s)$ werden. Wenn also Gl (38) für alle m' gilt, dann ist $\Phi(s)$ minimal und die $s(k)$ sind die Lösung der durch Gl (8) oder (13) gegebenen Aufgabe. Es muß also das Ziel des Iterationsprozesses sein, die Gleichheit von $P(m')$ und $H(m')$ für alle m' zu erreichen.

2. Fall: $P(m') > H(m')$ (39)

Es ist dann der Wert von

$$C = 2 \cdot (P(m') - H(m')) / G(m', m') \quad (40)$$

positiv, und es gilt

$$\Phi(s') = \Phi(s) - \Delta s(m') \cdot G(m', m') \cdot (C - \Delta s(m')) \quad (41)$$

Die Forderung $\Phi(s') < \Phi(s)$ wird nur erfüllt für ein positives $\Delta s(m')$, das kleiner als C ist, oder - im Hinblick auf die Bedingung (34a) - für

$$0 < \Delta s(m') < \min (C, \varepsilon \cdot s(m')) \quad (41a)$$

3. Fall: $P(m') < H(m')$ (42)

Dann ist C nach Gl (40) negativ. Aus Gl (41) folgt, daß $\Delta s(m')$ negativ, aber dem Betrage nach kleiner als $|C|$ sein muß. Es gilt die Bedingung

$$0 < |\Delta s(m')| < \min (|C|, \varepsilon \cdot s(m')) \quad (42a)$$

In beiden Fällen, das heißt im Falle (41a) und (42a) ist die Änderung von $s(m')$ so, daß der Wert von $H(m')$ nach $P(m')$ strebt.

Eine weitere Bedingung, auf die hier noch nicht eingegangen wurde, ist, daß natürlich $\Phi(s') > 0$ bleiben muß.⁵

Zu dieser Prozedur sind einige Anmerkungen erforderlich:

- (a) Wenn man m' alle Werte von 1 bis NR durchlaufen läßt, dann erhält man den Vektor Δs mit $\Delta s(1), \dots, \Delta s(NR)$. Jede der Komponenten $\Delta s(m')$ ist dem Vorzeichen nach so bestimmt, daß sie - wäre sie die einzige Variable - $\Phi(s)$ vermindert.
- (b) Die Größe $\Delta s(m')$ ist wegen der willkürlichen Wahl von ε ebenfalls noch weitgehend willkürlich. Bei dem Wunsch, mit möglichst wenigen Iterationen auszukommen, wählt man ε nicht zu klein. Das kann leicht dazu führen, daß nach Substitution aller $s(m')$ gemäß Gl (33) der neue Wert von $\Phi(s')$, der nach Gl (32) berechnet wird, größer ist als der vorherige Wert mit den ursprünglichen $s(k)$. In diesem Falle wird angenommen, daß das allein am Betrag der $\Delta s(m')$ liegt. Es werden dann alle $\Delta s(m')$ mit $\varepsilon' \cdot \Phi(s)/\Phi(s')$ (ε' etwa 0,5) multipliziert, das heißt verkleinert. Dieses Verfahren garantiert eine quasi gleiche Behandlung aller Variablen $s(k)$.
- (c) Es unzumutbar, nach jeder Berechnung eines $\Delta s(m')$ das entsprechende $s(m')$ sofort zu ändern. Das hätte direkten Einfluß auf die $H(m')$ für die nachfolgenden m' . Außerdem müßte man nach jeder Substitution der $s(m')$ das $\Phi(s)$ in Gl (37) durch das neue, kleinere $\Phi(s')$ ersetzen. Diese Verkleinerung käme aber bei jedem Iterationsprozeß (der über alle m' von 1 bis NR läuft) vorwiegend durch die ersten Variablen mit kleinem m' zustande. Da jeder neue Iterationsprozeß mit der Berechnung von $\Phi(s)$ nach Gl (32) beginnt und, wie oben unter (b) ausgeführt, gegebenenfalls eine Verkleinerung aller berechneten $\Delta s(m')$ erfordert, werden hierbei die ersten $\Delta s(m')$ bevorzugt; sie ändern sich schneller. Es hat sich gezeigt, daß in diesem Falle mehr Iterationen nötig sind, um eine gute Näherungslösung zu erreichen.

⁵ Es muß sogar $\Phi(s')$ größer als das Minimum von Φ sein; diese Bedingung ist allerdings nicht hilfreich, da dieses Minimum nicht bekannt ist.

3. Anwendungen

3.1 Vorbemerkungen

- (a) Die in Abschnitt 2 skizzierten Lösungsverfahren sollen auf die beiden in den Fig. 1 bis 4 dargestellten Beispiele angewendet werden. Diese Messungen wurden unter außerordentlich verschiedenen Bedingungen durchgeführt, - sehr lange Meßzeit einerseits, sehr kurze Meßzeit andererseits.

Die Langzeit-Messung (Fig. 1 und 2) ergab nach der Auswertung physikalisch befriedigende Ergebnisse. Das gilt sowohl für die Auswertung der gemessenen Zählraten ("Counts from analyser"), als auch der "Counts after smoothing". Das hier beschriebene Verfahren sollte deshalb in diesen Fällen zu sehr ähnlichen Ergebnissen führen und die eingangs gemachte Bemerkung stützen, daß diese relativ alten Programme unter geeigneten Meßbedingungen durchaus gute Ergebnisse liefern.

Dagegen sollten sich für die Kurzzeit-Messung (Fig. 3 und 4) sehr erhebliche "Verbesserungen" ergeben, - will heißen:

- negative Strahlungsintensitäten oder Flüsse dürfen nicht auftreten,
- das entfaltete Spektrum soll das bei 2,45 MeV gelegene Maximum der Strahlungsintensität so deutlich hervorheben, daß
- eine Aussage über die Breite des Strahlungsprofils möglich ist.

Natürlich ist es allein Sache des Experimentators, die Ergebnisse solcher Rechnungen von seinem Standpunkt aus zu interpretieren und zu würdigen. Das hier vorgeschlagene Auswerteverfahren stellt in diesem Sinne lediglich ein weiteres Hilfsmittel oder Handwerkszeug dar.

- (b) Im Abschnitt 2 wurde davon ausgegangen, daß die Zählraten gemessen und die Response-Funktionen bekannt sind. Für letztere ist das - jedenfalls in dem hier behandelten Fall der Neutronenspektroskopie mit Hilfe H_2 -gefüllter Proportionalzähler - nicht ganz richtig; der Begriff Response-Funktion ist nicht völlig eindeutig. Bei BENJAMIN, KEMSHALL und BRISTOCK [3] enthält die Response-Funktion beispielsweise nicht das Auflösungsvermögen des Zählers; das wird bei dem von

diesen Autoren entwickelten Auswerteverfahren auf andere, sehr spezielle Weise berücksichtigt.

Die Bestimmung der Response-Funktion ist natürlich ein Problem der Physik. Im Falle der Neutronenspektroskopie ist die Ermittlung der Response-Funktion außerordentlich schwierig, weil ihre Richtigkeit beziehungsweise Genauigkeit und ihr Gültigkeitsbereich nur indirekt bestimmt und getestet werden können. Ihr Näherungscharakter steht außer Frage. Andererseits ist diese Näherung doch so gut, daß sie bei den verwendeten Auswerteverfahren zu gut brauchbaren Ergebnissen führt. Wenn jedoch die Genauigkeitsanforderungen an die Auswertung erheblich gesteigert werden, dann erhebt sich zwangsläufig die Frage, ob die Response-Funktion in der bisher verwendeten Form dem Problem noch angemessen ist. - Diese Problematik soll anhand der Beispiele diskutiert werden.

- (c) Das Faltungsintegral Gl (1) stellt eine Abbildung des auf Energieeinheiten bezogenen Strahlungsprofils $f(x')$ auf die Zählraten eines Impulshöhenanalysators dar, also auf $g(x) = z(i)$. Die Zuordnung von Energiewerten (etwa in MeV) zu Kanalnummern wird als linear vorausgesetzt, kann also durch einen Eich- oder Kalibrierungsfaktor CAL beschrieben werden. Das reicht aber für die Abbildung nicht aus; es muß auch garantiert sein, daß der Energie $E = 0$ auch die Kanalnummer $i = 0$ entspricht. Sonst gibt es einen positiven oder negativen "Überhang" (engl.: BIAS) an Kanalnummern.⁶ Die dadurch notwendige Korrektur, BACK BIAS genannt, ist bei praktisch allen solchen Abbildungen zu beachten. Auf diese Frage muß also ebenfalls eingegangen werden.

3.2 Response-Funktion und Auflösungsvermögen

Die Response-Funktion, wie sie in [3] verwendet wird, beschreibt ausschließlich die Energieverteilung der durch Stoß mit monoenergetischen

⁶ Das führt bei Linienstrahlung natürlich dazu, daß die berechnete und die wahre Lage des Maximums nicht übereinstimmen.

Neutronen erzeugten Protonen. Für Kugelzähler kann sie nach SNIDOW [4] analytisch berechnet werden.

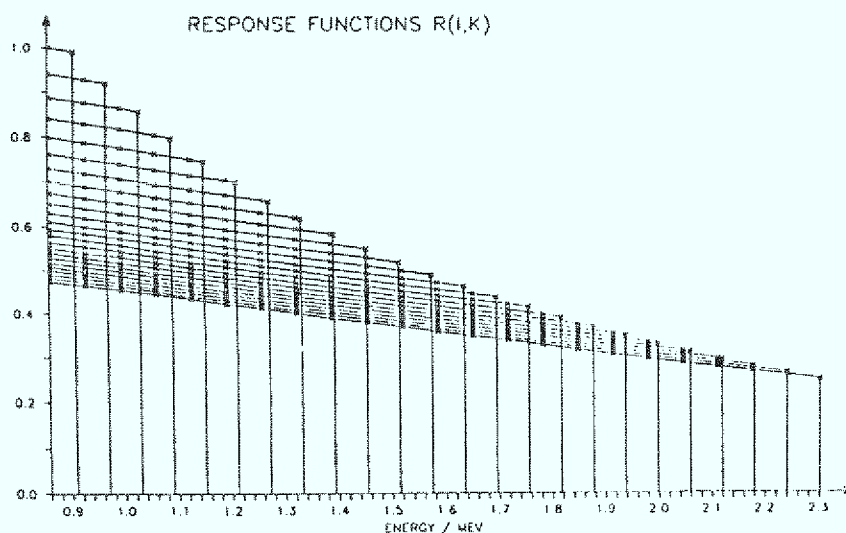


Fig. 5a: Response-Funktionen für $RES = 0$ nach SNIDOW [3,4].
Berechnete Werte durch Kreuze markiert.

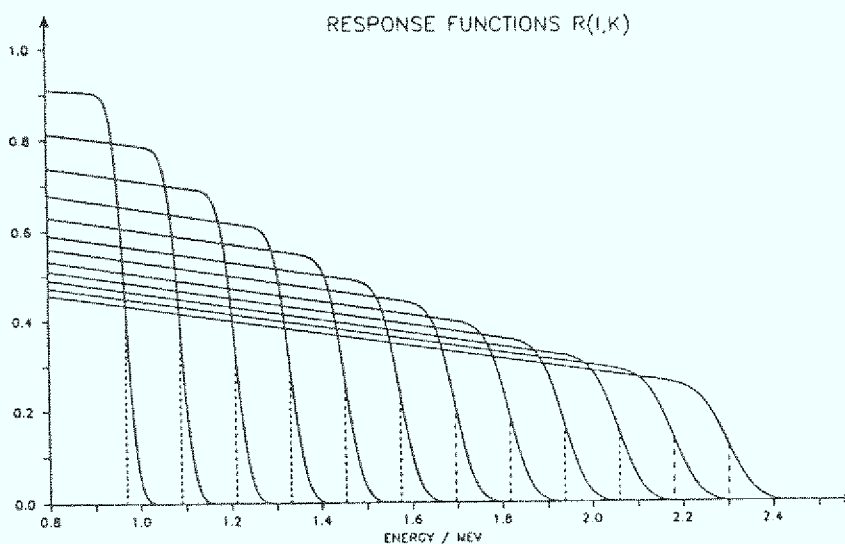


Fig. 5b: Response-Funktionen für $RES = 5\%$, berechnet
nach den Gln (44) und (45).

Fig. 5: Einfluß des Auflösungsvermögens des Zählers (RES) auf
die Form der Response - Funktionen

In Fig. 5a sind solche Funktionen $R(i,k)$ für einige Energien (Referenzlinien) in normierter Form aufgetragen. Da sie das Auflösungsvermögen des Zählers nicht enthalten, fallen sie bei der entsprechenden Referenzlinie

auf Null ab; für Energieen, die größer als die der Referenzlinie sind, ist $R(i,k) = 0$. Für kleinere Energieen lassen sie sich darstellen in der Form

$$R(i,k) = RH(2,k) \cdot DX + RH(1,k) \quad (43)$$

mit

$$DX = xr(k) - x(i) \quad (43a)$$

Dabei ist $x(i)$ der Energiewert, der der Kanalnummer i entspricht; $xr(k)$ ist der Energiewert der k -ten Referenzlinie; EBOT ist die untere Grenze des auszuwertenden Energieintervalls, EBOT entspricht der Energie des Kanals IA. Für $x(i) = xr(k)$ ist $R(k,k) = RH(1,k)$, für $x(i) = EBOT$ ist $R(1,k) = RH(2,k) \cdot (xr(k) - EBOT) + RH(1,k)$. Die $RH(1,k)$ und $RH(2,k)$ wurden mit Hilfe des SNIDOW-Programms [3,4] bestimmt.

Fig. 5b zeigt Response-Funktionen, die das Auflösungsvermögen RES des Zählers enthalten. Dabei wurde angenommen, daß das Apparate-Profil die Form einer Gauß-Kurve⁷ hat und das Auflösungsvermögen $RES = 5\%$ beträgt. Diese Response-Funktionen, sie sollen mit $R'(i,k)$ bezeichnet werden, hängen mit den obigen $R(i,k)$ in folgender Weise zusammen

$$R'(i,k) = 0,5 \cdot R(i,k) \cdot (1 + \operatorname{erf}(\alpha \cdot (xr(k) - x(i)))) \quad (44)$$

für $xr(k) \geq x(i)$, beziehungsweise

$$R'(i,k) = 0,5 \cdot RH(1,k) \cdot (1 - \operatorname{erf}(\alpha \cdot (x(i) - xr(k)))) \quad (44a)$$

für $xr(k) < x(i)$.

Diese Beziehungen erhält man aus Gl (1), wenn man dort für $R(x' - x)$ die Response-Funktion nach Gl (43)

$$R(x' - x) = R(i,k) = R(x' - x(i)) \quad (45)$$

und für $f(x')$ die Gauß-Funktion

$$f(x') = \pi^{-1/2} \cdot \alpha \cdot e^{-\alpha^2 \cdot (x' - xr(k))^2} \quad (46)$$

⁷ Das ist - jedenfalls für die Untersuchung der Linienstrahlung - eine außerordentlich schwerwiegende Annahme. In Abschnitt 3.4 wird darauf näher eingegangen.

einsetzt und in Gl (1) als untere Integrationsgrenze $x(i)$ wählt (die Response-Funktion ist für $x' < x(i)$ gleich Null). Die Halbwertsbreite HWB der Gauß-Kurve ist einerseits durch das experimentell bestimmte Auflösungsvermögen (sein Wert sei RES in %) gegeben

$$HWB = x_r(k) \cdot RES / 100 \quad (47)$$

Es hängt andererseits mit α oder α^2 zusammen gemäß

$$\alpha^2 = 4 \cdot \ln 2 / (HWB)^2 \quad (48)$$

Mit RES von der Größenordnung 2 - 5 % wird α^2 sehr groß, das Profil der Gauß-Kurve nach Gl (46) also sehr schmal, und es ist $f(x')$ nur in der Umgebung von $x_r(k)$ wesentlich von Null verschieden. Dort ändert sich die Response-Funktion wenig; sie wird mit $x' = x_r(k)$ vor das Integral gezogen. Es verbleibt das Integral über die Gauß-Funktion, durch die die erf-Funktion definiert ist [5]. Dieser so erhaltene Ausdruck ist die Response-Funktion $R'(i,k)$. Ihr Näherungscharakter ist offenkundig, - und zwar weniger wegen der hier nur kurz skizzierten mathematischen Manipulationen,⁸ als vielmehr durch die in Gl (46) gemachte Annahme. Gl (46) entspricht der Apparate-Funktion der optischen Spektroskopie. Sie ist mithin keine a priori vorgegebene Funktion, sondern muß auf experimentellem Wege oder theoretisch ermittelt werden. Wie HOENEN [6] gezeigt hat, handelt es sich im vorliegenden Falle um eine Funktion mit stark ausgeprägter Asymmetrie. Im Rahmen dieser Ausführungen soll hierauf aber nicht näher eingegangen werden.

In Fig. 5b ist jeweils die Lage der Referenz-Energie $x_r(k)$ durch eine gestrichelte Linie gekennzeichnet. Die Funktionen sind nach rechts so weit gezeichnet, wie der Einfluß der erf-Funktion in Gl (44a) noch merklich ist, ihr Wert also unter 0,99 liegt. Für $RES \rightarrow 0$, also $\alpha \rightarrow \infty$, gehen die Kurven von Fig. 5b in die von Fig. 5a über.

⁸ Für eine korrekte Behandlung hat man $R(x'-x)$ in Gl.(45) in allgemeiner Form darzustellen. Die (Hilfs-) Größen $RH(1,k)$ und $RH(2,k)$ in Gl.(43) sind nur für eine vorgegebene Referenzlinie $x_r(k)$ konstant, - sie hängen von diesen $x_r(k)$ ab. Das muß bei der Berechnung des Integrals in Gl.(1) berücksichtigt werden.

3.3 Entfaltung von Kontinuum-Spektren

3.3.1 Langzeit-Messung

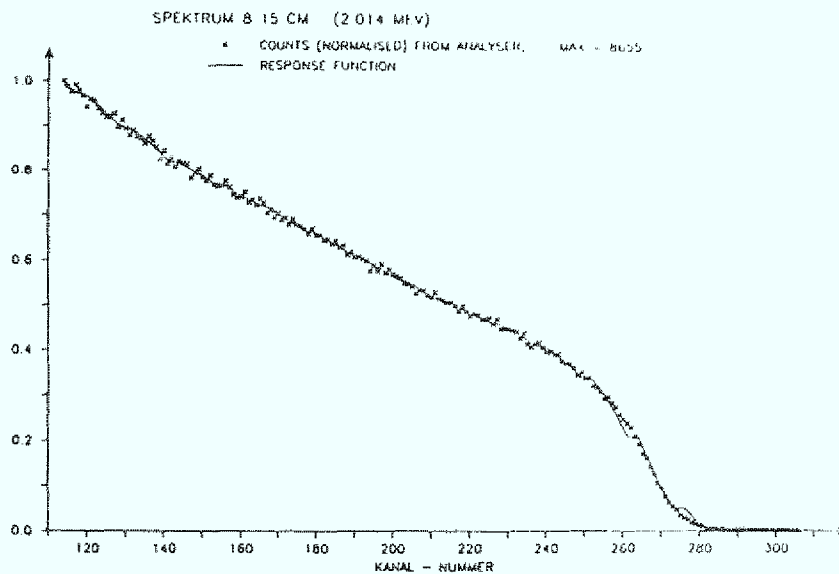


Fig. 6a: Für die Auswertung verwendete Zählraten, aufgetragen über den Kanal-Nummern.

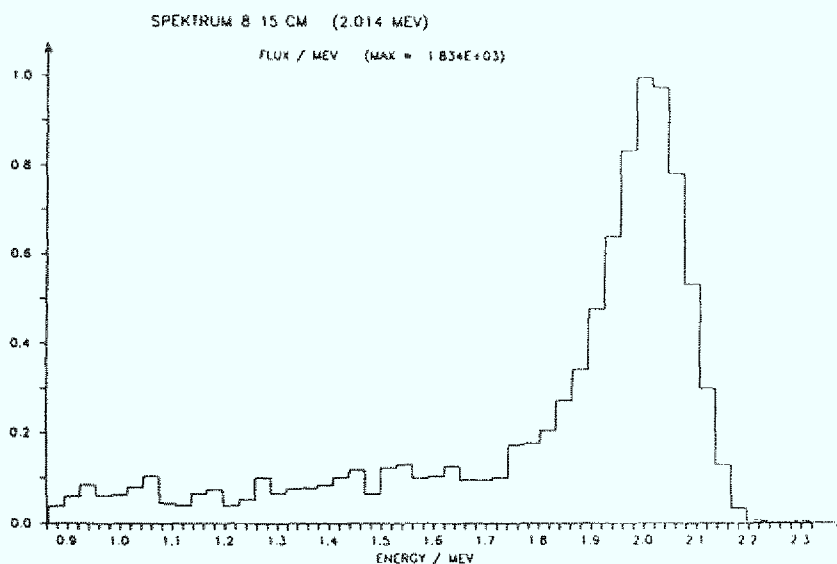


Fig. 6b: Berechnetes Neutronenspektrum

Fig. 6: Neutronen-Spektrum als Kontinuum-Strahlung entfaltet.
Langzeit - Messung

Fig. 6 zeigt die Entfaltung des Spektrums der Langzeit-Messung; die Daten für die Zählraten, den Zähler und das Protonenspektrum entsprechen denen von Fig. 1 oder - wenn man von der Glättung der Zählraten absieht - von

Fig. 2. Nach der Entfaltung wurden mit den erhaltenen Werten für die $s(k)$ gemäß Gl (7) diejenigen Zählraten berechnet, die dem entfalteten oder "wahren" Strahlungsspektrum entsprechen, - es wurde also die Probe gemacht, ob sich aus dem Ergebnis der Entfaltung auf die gemessenen Zählraten zurückrechnen läßt. Diese Kurve ist in Fig. 6a als durchgezogene Linie dargestellt und wird dort "RESPONSE-FUNCTION" genannt. (Sie stimmt so gut mit den gemessenen Zählraten überein, daß sie sich von ihnen kaum abhebt). Das Neutronen-Spektrum in Fig. 6b ist praktisch dasselbe wie in Fig. 2b.

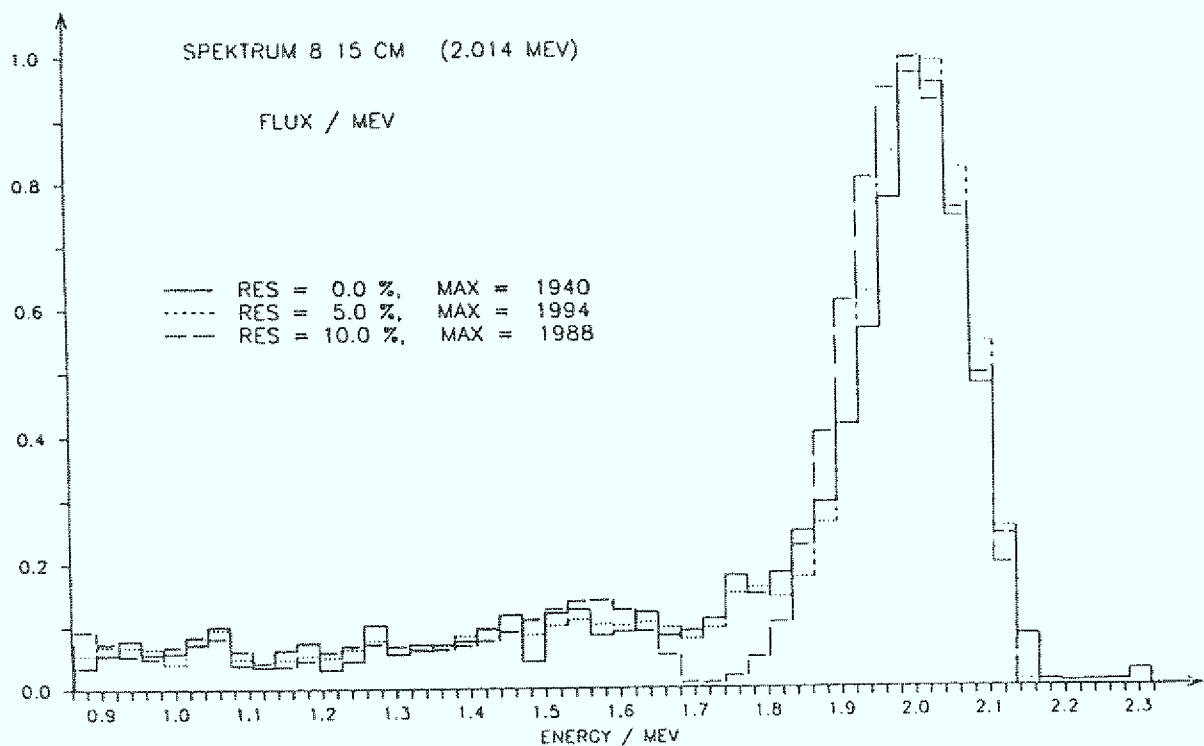


Fig. 7: Einfluß des Auflösungsvermögens des Zählers
auf die Entfaltung des Neutronen-Spektrums.
Langzeit - Messung

Fig. 7 zeigt, wie sich das Auflösungsvermögen des Zählers auf die Entfaltung auswirkt. Der Wert $RES = 0$ ist sicher zu klein, der Wert $RES = 10 \%$ vermutlich zu groß gewählt. Die maximalen Flußdichten sind auf dem Bild in der Spalte "MAX =" angegeben. Sie unterscheiden sich wenig voneinander und liegen zwischen den Werten in Fig. 1b und Fig. 2b. Sie sind größer als im Falle der Fig. 6. Dort wurde mit $RES = 2,5 \%$ gerechnet, es wurden aber nur 400 Iterationen durchgeführt; im Falle der Fig. 7 waren es 800 Iterationen.

Für die Praxis ist die Frage von Bedeutung, wann der an sich unendliche Iterationsprozeß abgebrochen werden soll. Eine Möglichkeit, auf die oben (Abschnitt 2) bereits hingewiesen wurde, besteht darin, eine kleine positive Zahl ε vorzugeben und den Prozeß dann zu beenden, wenn sich die Summen der Quadrate Φ beziehungsweise Φ' vor und nach einer Iteration so wenig voneinander unterscheiden, daß gilt $(\Phi - \Phi')/\Phi < \varepsilon$. Das kann, wenn ε sehr klein gewählt ist, zu ungewollt vielen Iterationen führen (ein realistischer Wert für ε ist kaum begründbar). Deshalb ist es zweckmäßig, neben einem solchen Abbruchkriterium eine maximale Anzahl von Iterationen (ITM) vorzugeben und den Iterationsprozeß spätestens nach ITM Iterationen abubrechen. Eine Darstellung $\Phi = \Phi(\text{ITM})$, wie sie in Fig. 8 gegeben ist, kann für die Wahl eines geeigneten Wertes für ITM nützlich sein. Der in Fig. 8 nicht eingetragene Wert für Φ vor Beginn der Iterationen betrug 2,955. - Für RES = 5 % und ITM = 1600 erhält man für die maximale Flußdichte den Wert 2171, also einen Wert, der merklich größer ist als derjenige in den Fig. 6 und 7.

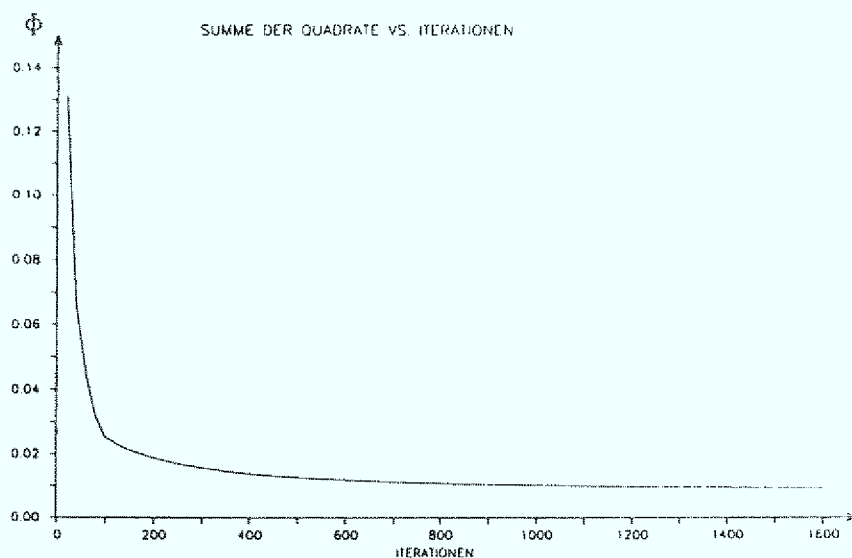


Fig. 8: Abnahme der Summe der Quadrate mit der Anzahl der Iterationen.

Solche Rechnungen und Parameterstudien lassen den Schluß zu, daß bei Langzeit-Messungen von dieser Qualität der mit der Methode der nicht-linearen Optimierung verbundene größere Aufwand nicht erforderlich ist.

3.3.2 Kurzzeit-Messung

Die Auswertung der Kurzzeit-Messung ist in Fig. 9 dargestellt. Fig. 9a zeigt die gemessenen Zählraten, die bei der Entfaltung verwendet wurden,

und die unter Verwendung der so erhaltenen $s(k)$ zurückgerechneten Zählraten ("RESPONSE FUNCTION") für $RES = 2.5\%$. Die Zählraten sind sehr klein, ihr größter Wert beträgt 56; ihre Streuung ist außerordentlich groß. Das führt zu entsprechenden Schwankungen bei den Flußdichten, die in Fig. 9b dargestellt sind. Es wurden 800 Iterationen durchgeführt, was eine gute Annäherung an das Minimum von Φ bedeutet.

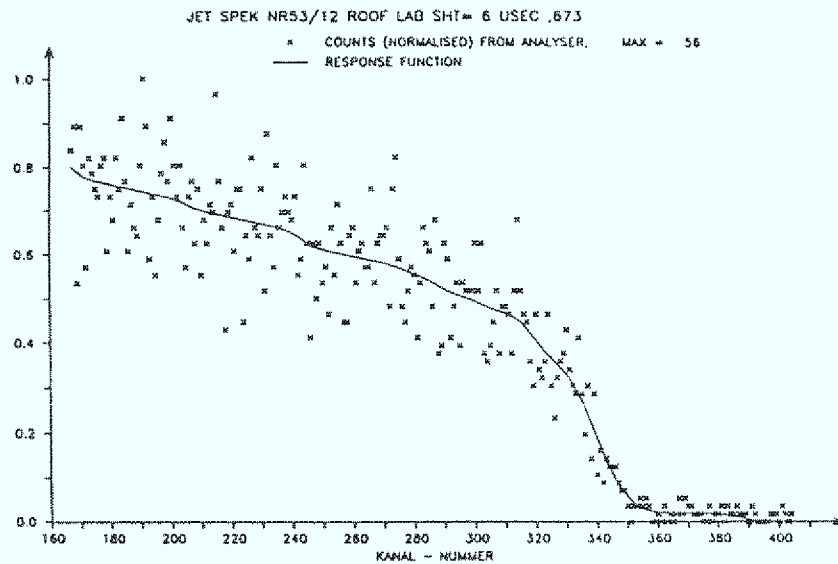


Fig. 9a: Für die Auswertung verwendete Zählraten, aufgetragen über den Kanal-Nummern.

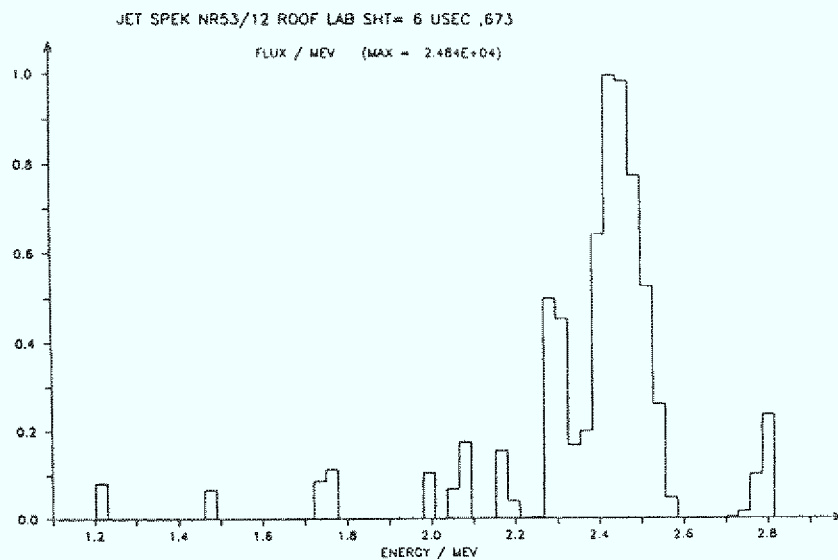


Fig. 9b: Berechnetes Neutronenspektren. $RES = 2,5\%$.

Fig. 9: Neutronen-Spektrum als Kontinuum-Strahlung entfaltet.
Kurzzeit - Messung

Der Unterschied zwischen Fig. 9b und Fig. 4b ist offenkundig; ein Vergleich mit Fig. 3b, was angemessener wäre, ist natürlich nicht möglich. Die großen Schwankungen bei den Neutronenflüssen in Fig. 9b sind verständlich. Bei 56 Referenzlinien⁹ und etwa 200 relevanten Kanälen (von 165 bis 365) bestimmen durchschnittlich etwa 4 Kanäle beziehungsweise deren Zählraten die Response-Funktion einer Referenzlinie oder das ihr entsprechende $s(k)$. Damit hat jede Zählrate ein hohes Gewicht, ihre Abweichung vom "richtigen" oder "Mittel"-Wert schlägt weitgehend auf die $s(k)$ durch.

Das Auflösungsvermögen des Zählers hat hier einen großen Einfluß auf die Form des entfalteten Spektrums, insbesondere im Bereich des Intensitätsmaximums zwischen 2,2 und 2,6 MeV. Das zeigt der Vergleich von Fig. 9b, hier betrug das Auflösungsvermögen $RES = 2,5\%$, und Fig. 10, wo mit $RES = 5\%$ gerechnet wurde. Allerdings - und das muß ausdrücklich vermerkt werden - liegt das weniger daran, daß es sich um eine Kurzzeit-Messung mit großer Streuung der Zählraten handelt. Der Grund ist vielmehr die Tatsache, daß das Spektrum von einer Linienstrahlung stammt, deren Entfaltung sehr sensibel vom Auflösungsvermögen des Zählers abhängt. In diesem Sinne ist die Gegenüberstellung von Langzeit-Messung und Kurzzeit-Messung dem Sachverhalt nicht ganz angemessen.

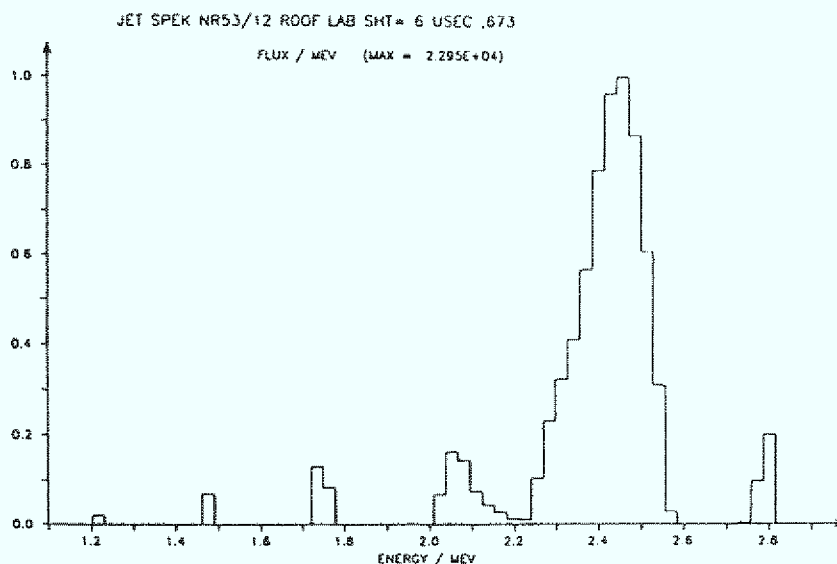


Fig. 10: Entfaltung der Kurzzeit-Messung mit $RES = 5\%$.

⁹ Es ist Zufall, daß die Zahl der Referenzlinien und die größte Zählrate denselben Wert 56 haben.

3.4 Entfaltung von Linien-Spektren

Linien-Spektren werden untersucht, um

- (1) die *Energie* und
- (2) die *Form* der Linien zu ermitteln.

Auf die Bestimmung der Energie soll hier nicht eingegangen werden; die damit verbundenen Fragen ergeben sich aus den Darlegungen im nächsten Abschnitt 3.5.

Die Bestimmung der Linienform beziehungsweise des Linienprofils reduziert sich in dem hier betrachteten Fall auf die Bestimmung der Halbwertsbreite der Linie, denn die Doppler-Verbreiterung ergibt ein Gauß-Profil gemäß Gl (10), wobei dort der Wert von $q(2)$ zu ermitteln ist. Dabei spielen zwei Faktoren eine wichtige Rolle: (a) die Streuung der Meßwerte und (b) die Response-Funktion, insbesondere ihr durch das Apparate-Profil gegebener Anteil. Diese beiden Punkte sollen näher untersucht werden.

3.4.1 Vorbereitende Untersuchungen

Damit ein Spektrum als Linien-Spektrum entfaltet, also mit dem Verfahren nach Abschnitt 2.2 behandelt werden kann, muß es im Bereich des Zählers - und allein darauf kommt es an - tatsächlich als Linien-Spektrum vorliegen. Diese Aussage ist aus zwei Gründen nicht trivial. Es läßt sich im allgemeinen allein aus den Zählraten auch nicht andeutungsweise ablesen, ob es sich um das Spektrum einer Linien- oder einer Kontinuum-Strahlung handelt. Zum anderen setzt die Entfaltung von Linien-Spektren die Kenntnis des qualitativen Verlaufs des Strahlungsprofils gemäß Gl (10) oder Gl (11) voraus, also eine gewisse Korrespondenz, einen Zusammenhang zwischen Strahlungsprofil und dem Spektrum der Zählraten.

Wenn man das Spektrum zunächst als ein Kontinuum-Spektrum behandelt, erhält man Hinweise darauf, ob man diese Voraussetzung als erfüllt ansehen kann, oder ob man gegebenenfalls die Nebenbedingung Gl (11) geeignet wählen oder modifizieren muß. - Das in den Fig. 1b, 2b oder 6b dargestellte Spektrum ist vielleicht ein typisches Beispiel. Hier muß sich der Experimentator entscheiden, ob er diese Strahlung noch als gauß-ähnlich ansehen und die Strahlung im Bereich von 0,9 bis 1,7 MeV ignorieren oder

als Meßfehler abtun will, oder ob er für Gl (10) eine andere Form für das Profil wählen soll.

Im Falle der Kurzzeit-Messung (Fig. 9 und 10) sprechen zwei wichtige Fakten dafür, daß es sich um eine Linienstrahlung handelt:

- es gibt im Bereich bis 2 MeV keine kontinuierliche Flußdichte wie man sie bei der Langzeit-Messung im Energiebereich von 0,9 bis 1,7 MeV bei allen Entfaltungen mit einem Auflösungsvermögen zwischen 0 und 10% erkennt;
- die Entfaltung mit RES = 7,5 und 10% läßt die "Nebenlinien" bei 1.2, 1.5, 1.7 und 2.8 MeV mehr und mehr zurücktreten beziehungsweise ganz verschwinden. Ursache für diese "Nebenlinien" sind offensichtlich die sehr großen Streuungen der Zählraten.

Für die Halbwertsbreite der Linie würde man aus Fig. 10 einen Wert um 0.2 MeV annehmen, also etwa 8% der Energie der 2.45 MeV-Strahlung.

3.4.2 Das Apparate-Profil

UNSÖLD ([1], p. 258) hat sehr deutlich darauf hingewiesen, "daß es bei der Zusammensetzung der Breite eines gemessenen Linienprofils aus wahrem und Apparatprofil ganz wesentlich auf deren *Form* ankommt". Diese im Rahmen der optischen Spektroskopie gemachte Aussage gilt in vollem Umfange auch für die Spektroskopie von Kernstrahlungen. Um das zu demonstrieren, wird als Apparatprofil neben der *Gauß*-Funktion nach Gl (46) - also den Response-Funktionen nach Gl (44) und (44a) - auch die *Dispersions*-Funktion verwendet. Die Ergebnisse der Entfaltungen mit diesen beiden Funktionen werden miteinander verglichen.

Die Dispersions-Funktion ist gegeben durch

$$f(x') = (\beta/\pi) / [\beta^2 + (x' - x_r(k))^2] \quad (49)$$

Zwischen dem Parameter β , der Halbwertsbreite HWB und dem Auflösungsvermögen RES des Zählers bestehen die Beziehungen

$$\beta = \text{HWB} / 2 = x_r(k) \cdot \text{RES} / 200 \quad (50)$$

Wenn man die Dispersions-Funktion wie oben die Gauß-Funktion in die Response-Funktion einarbeitet, dann erhält man in Analogie zu den Gln (44) und (44a) die neuen Response-Funktionen $R'(i,k)$ für $x_r(k) \geq x(i)$:

$$R'(i,k) = 0,5 \cdot R(i,k) \cdot (1 + (2/\pi) \cdot \arctan(\beta \cdot (x_r(k) - x(i)))) \quad (51)$$

beziehungsweise für $x_r(k) < x(i)$:

$$R'(i,k) = 0,5 \cdot R(i,k) \cdot (1 + (2/\pi) \cdot \arctan(\beta \cdot (x_r(k) - x(i)))) \quad (51a)$$

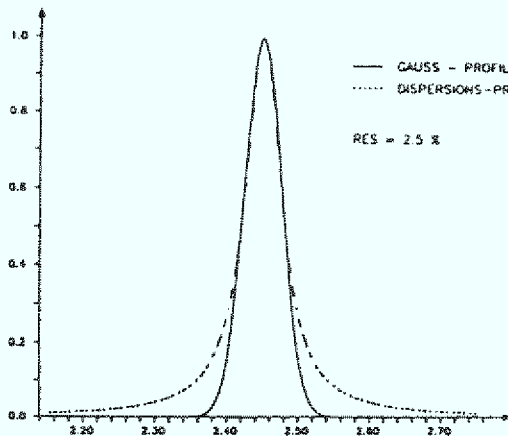


Fig. 11a
Vergleich von Gauß-
und Dispersions-Profil.

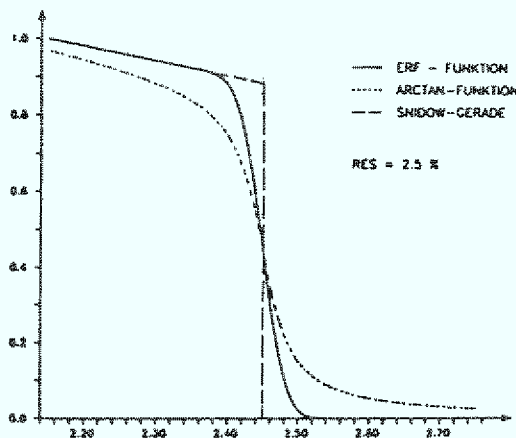


Fig. 11b
Vergleich von erf- und
arctan - Funktion für
RES = 2,5 %.

Fig. 11: Einfluß von Gauß- und Dispersions-Profil auf die
Form der Response-Funktion.

Es ist nützlich, sich den Unterschied zwischen diesen beiden Apparate- beziehungsweise Response-Funktionen klarzumachen. In Fig. 11a sind Gauß- und Dispersions-Funktion für RES = 2.5% um $x_r = 2,45$ in normierter Form aufgetragen. Man sieht, daß sie im Bereich des Maximums praktisch zusammenfallen; merkliche Unterschiede zeigen sich nur auf den Flanken für Funktionswerte, die kleiner sind als etwa 25 % des Maximums. Den Anteil an der Response-Funktion, der von diesen Apparate-Profilen herrührt (das ist im Falle des Gauß-Profiles wesentlich die erf-Funktion, im Falle des

Dispersions-Profils die arctan-Funktion) zeigt Fig. 11b. Der Unterschied ist erheblich.

3.4.3 Bestimmung der Linienbreite

Es wird die in Fig. 3a dargestellte Kurzzeit-Messung ausgewertet, wobei die Zählraten von etwa Kanal 160 bis Kanal 400 verwendet werden, - das sind die Zählraten in Fig. 9a. Die Energie der Linie beträgt 2,45 MeV, das entspricht dem Kanal 337.

Man erwartet, daß die berechnete Halbwertsbreite der Linie von einer Reihe von Faktoren abhängt:

- (a) Von der *Form* des Apparate-Profils, - es wird hierfür ein Gauß- und ein Dispersions-Profil angenommen.
- (b) Von der *Breite* des Apparate-Profils, also vom Auflösungsvermögen des Zählers.

Da man aus Fig. 10 eine Linienbreite von etwa 200 keV, also von etwa 0,8 % der Energie der Linie annehmen kann, muß die Breite des Apparate-Profils kleiner sein. Für das gauß-förmige Apparate-Profil wird $RES = 2,5 \%$, 5% und $7,5 \%$ gewählt; im Falle des Dispersions-Profils erhält man mit $RES = 2,5$ und 3% vergleichbare Werte.

- (c) Von den verwendeten Zählraten.

Die Auswertung dieser Messung als Kontinuum-Strahlung (Fig. 9b und 10) zeigt neben der ausgeprägten (Haupt-) Linie um 2,45 MeV eine Reihe schwächerer "Neben-Linien". Hier stellt sich die Frage, wie es sich auf die Linienbreite auswirkt, wenn man nicht den gesamten oben angegebenen Bereich der Zählraten zur Auswertung heranzieht. Es sollte hinreichen, diejenigen Zählraten zu berücksichtigen, die in unmittelbarer Umgebung der Energie von 2,45 MeV, also in der Umgebung von Kanal 337 liegen.

In der Parameterstudie wurde deshalb die untere Energiegrenze, also der Wert EBOT, jeweils um 0,1 MeV vergrößert. Das bedeutet, daß die

kleinste Kanalnummer von 160 jeweils um 14 erhöht wird. Diese so definierte kleinste Kanalnummer wird NEBOT genannt. Das geht natürlich nur solange, bis EBOT mit der Energie der 1. Referenzlinie zusammenfällt, - s. den nächsten Punkt.

- (d) Von der Wahl der Referenzlinien, das heißt von der Anzahl NR und dem Abstand benachbarter Referenzlinien. Es wurde zunächst $NR = 51$ gewählt, wobei die Linie 26 der Energie 2,45 MeV beziehungsweise dem Kanal 337 entsprach. Der Abstand zwischen den Referenzlinien betrug 1 Kanalnummer.

Wenn der Bereich der Zählraten von unten her dadurch immer mehr eingeschränkt wird, daß der Wert EBOT jeweils um 0,1 MeV vergrößert wird, dann ergibt sich der Fall, wo EBOT mit der ersten Referenzlinie zusammenfällt oder sogar größer wird. Das darf nicht geschehen; nach den Gln (43) und (43a) muß $DX \geq 0$ sein. Sobald dieser Fall eintrat, wurde deshalb wie folgt verfahren: Es wurde jeweils die Anzahl NR der Referenzlinien um 2 erniedrigt, wobei die jeweils mittlere Referenzlinie dem Kanal 337 zugeordnet wurde; EBOT wurde so gewählt, daß die entsprechende Kanalnummer NEBOT gerade um 2 Kanäle kleiner war als die Kanalnummer der kleinsten Referenzlinie.

Das hat zwei beachtliche Konsequenzen:

- In der Umgebung von Kanalnummer 337 sind die relativen Streuungen der Zählraten besonders groß. Wenn dann die Anzahl der zur Auswertung verwendeten Zählraten noch reduziert wird, dann bekommt jede Zählrate beziehungsweise deren Streuung ein noch größeres Gewicht; das muß sich auf die Auswertung unmittelbar auswirken.
- Wenn die Anzahl NR der Referenzlinien (insbesondere bei einem Abstand von nur 1 Kanalnummer) immer weiter verkleinert wird, dann liegen schließlich alle Referenzlinien nur noch in unmittelbarer Umgebung des Linienmaximums. Damit läßt sich die Linienbreite aber nicht mehr bestimmen.

Unter diesen Gesichtspunkten wurden Parameterstudien durchgeführt, die auf den folgenden Bildern dargestellt sind. Aufgetragen sind jeweils die berechneten Halbwertsbreiten (HWB) der Linie in Abhängigkeit von dem Bereich der verwendeten Zählraten. Zur Auswertung herangezogen wurden die

Zählraten der Kanäle von NEBOT an aufwärts, wobei NEBOT diejenige Kanalnummer ist, die dem unteren Energiewert EBOT entspricht.

Auf Fig. 12 nimmt im Bereich von NEBOT = 160 ... 310 der Wert von HWB mehr oder weniger kontinuierlich ab. Das ist im Hinblick auf die Fig. 9b und 10 verständlich. Es ist hierbei unerheblich und kann dahingestellt bleiben, ob es sich dort tatsächlich um echte "Nebenlinien" handelt; - wenn man durch das Auswerteverfahren ein solches Spektrum in eine gauß-förmige Linienstruktur zwingt, kann das nur zu einer größeren Halbwertsbreite für die Linie führen. Nimmt man diese Zählraten aus der Auswertung heraus und beschränkt sich mehr und mehr auf diejenigen Zählraten, die dem eigentlichen Linienprofil entsprechen, dann sollte die berechnete Halbwertsbreite kleiner werden und sich dem "wahren" Wert annähern.

Auch der Einfluß des Apparateprofils ist verständlich; je breiter das Apparateprofil, umso kleiner muß die berechnete Linienbreite sein. In diesem Sinne verlaufen die drei oberen Kurven (Gauß-Profil) und die beiden unteren Kurven (Dispersions-Profil), jeweils für sich genommen, erwartungsgemäß. Vergleicht man dagegen die Kurven, die zu gleich breiten, aber unterschiedlichen Apparateprofilen gehören, also Gauß-Profil und Dispersions-Profil mit jeweils RES = 2.5 %, dann wird klar, wie sehr es bei der Apparatefunktion nicht nur auf deren *Breite*, sondern auch und insbesondere auf deren *Form* ankommt.

Für NEBOT > 310, also in unmittelbarer Umgebung der Linie, funktioniert das Auswerteverfahren mit den hier verwendeten Parametern nicht mehr (im Falle des Gauß-Profils) oder führt zu erheblichen Schwankungen in den Ergebnissen (im Falle des Dispersions-Profils). Hierzu ist anzumerken: Die Anzahl NR der Referenzlinien wurde laufend um 2 erniedrigt, damit die am weitesten links liegende Referenzlinie immer um 2 größer war als NEBOT. Andererseits betrug der Abstand ND zwischen den Referenzlinien nur 1 Kanalweite. Es gibt dort also fast ebenso viele Referenzlinien wie Kanäle; jede Schwankung in der Zählrate eines Kanals beeinflusst deshalb die Auswertung sehr unmittelbar. Die Verhältnisse werden in diesem Bereich günstiger, wenn man statt mit NR = 51 und ND = 1 mit NR = 17 und ND = 3 arbeitet, wodurch die Referenzlinien denselben Energie- beziehungsweise Zählratenbereich abdecken. Aber dann stützt sich auch in diesem kritischen Bereich im Mittel jede Referenzlinie auf wenigstens drei Kanäle beziehungsweise deren Zählraten. Das führt zu stabileren Verhältnissen. Auf die

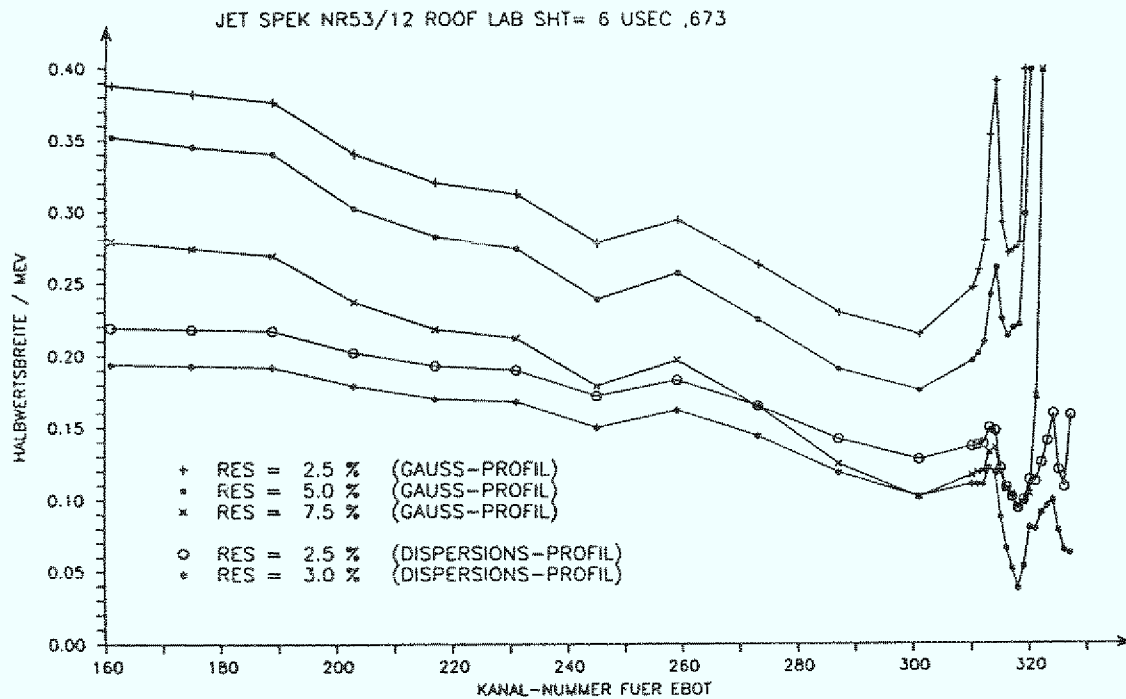


Fig. 12: Halbwertsbreite der 2,45 MeV - Linie
in Abhängigkeit vom Bereich der
verwendeten Zählraten

1. Parameterstudie

Daten: - Counts from Analyser (s. Fig. 9a)

NEBOT = Kanal-Nummer für EBOT

- Anzahl der Referenzlinien

= Bis NEBOT = 310: NR = 51

= Dann: NR = NR - 2 bis NR = 15

Abstand der Referenzlinien: ND = 1

- Apparat-Funktion

= Gauß-Profil

RES = 2.5 5.0 7.5 %

= Dispersions-Profil

RES = 2.5 3.0 %

Im Falle des Gauß-Profiles versagt das Lösungsverfahren
für NEBOT > 310. Die viel zu großen Halbwertsbreiten
wurden dann gleich 0,4 MeV gesetzt.

Ergebnisse im Gebiet NEBOT = 160 ... 310 hat das keinen erwähnenswerten Einfluß.

Diese Tatsache, daß die Auswertung gerade in einem Gebiet versagt oder zu außergewöhnlichen Schwankungen führt, wo man gute Ergebnisse erwartet oder zumindest erhofft, ist natürlich völlig unbefriedigend. Insbesondere läßt sich aus den Daten von Fig. 12 und aus vergleichbaren Rechnungen nicht ableiten, ob das vorwiegend an den großen Streuungen der Zählraten liegt, oder ob die eigentliche Ursache hierfür im Auswerteverfahren selbst begründet ist.

Deshalb wurde der schon im Abschnitt 2.2 angedeutete Weg beschritten; es wurde das Faltungsintegral geschlossen dargestellt, - und zwar in einer Näherung, die in etwa der Näherung der Gln (44) und (44a) für die Apparate-Funktion entspricht. Faltet man die Gauß-Funktion, die das Apparate-Profil beschreibt:

$$f(x'') = \pi^{-1/2} \cdot \alpha \cdot e^{-\alpha^2 \cdot (x'' - x')^2} \quad (52)$$

mit der Gauß-Funktion, die die Dopplerverbreiterung der Neutronenlinie beschreibt:

$$h(x'') = \pi^{-1/2} \cdot \beta \cdot e^{-\beta^2 \cdot (x'' - x_0)^2} \quad (53)$$

dann erhält man wieder eine Gauß-Funktion

$$F(x') = \pi^{-1/2} \cdot A \cdot e^{-A^2 \cdot (x' - x_0)^2} \quad (54)$$

mit

$$A^2 = \beta^2 / [1 + (\beta/\alpha)^2] \quad (55)$$

Dabei ist α durch das Auflösungsvermögen des Zählers gemäß Gl (47) und (48) gegeben,¹⁰ während β über

$$\beta = 2 \cdot \sqrt{\ln 2} / \text{HWB} \quad (56)$$

mit der zu bestimmenden Halbwertsbreite HWB der Neutronenlinie zusammenhängt.

¹⁰ In den Gln (47) und (48) bedeutet die dort verwendete Bezeichnung "HWB" also die Halbwertsbreite des *Apparate*-Profils; in Gl (56) ist HWB die Halbwertsbreite des durch Doppler-Effekt verbreiterten *Linien*-Profils.

Geht man statt mit $f(x')$ nach Gl (46) nun mit $F(x')$ nach Gl (54) in die Gl (1) ein und berechnet dieses Integral auf dieselbe Art, wie das in Abschnitt 3.2 skizziert wurde, dann erhält man

$$g(x(i)) = 0,5 \cdot S \cdot R(i,k) \cdot (1 + \operatorname{erf}(A \cdot (x_0 - x(i)))) \quad (57)$$

Hier bedeutet S die Amplitude der Gauß-Kurve; der Index k in $R(i,k)$ bezieht sich auf die einzige Referenzlinie x_0 . Die Werte für S und β sind so zu bestimmen, daß Gl (57) die Zählraten im Sinne der Methode der kleinsten Quadrate approximiert. Da β nicht-linear in Gl (57) enthalten ist, muß auf die sogenannte "Non Linear Least Square" - Methode zurückgegriffen werden, die in Abschnitt 2.2 bereits abgehandelt wurde. Hier handelt es sich um den Spezialfall mit nur einer Referenzlinie, die mit der Linie bei $x_0 = 2,45$ MeV identisch ist.

Hierzu sind einige Anmerkungen erforderlich:

- Gl (57) stellt in zweifacher Hinsicht eine Näherung dar: Der durch die SNIDOW-Gerade gegebene Anteil an der Response-Funktion wurde ignoriert sowohl bei der Faltung der Funktionen $f(x'')$ und $h(x'')$, als auch bei der Integration über die Funktion $F(x')$.
- Es ist deshalb die bisher angewandte Methode mit den NR Referenzlinien und den entsprechenden Response-Funktionen nach Gl (44) und (45) für jede dieser Linien nicht identisch und nur bedingt vergleichbar mit der durch Gl (57) repräsentierten Methode.
- Eine korrekte mathematische Behandlung des Faltungsintegrals setzt eine allgemeinere Darstellung der SNIDOW-Gerade voraus und verlangt die Einbeziehung auch dieses Teils des Integranden in die Faltung. Das ist mit einem außerordentlichen Aufwand verbunden, der im Rahmen dieser Ausführungen nicht gerechtfertigt erscheint. Das gilt in noch stärkeren Maße, wenn man für $f(x'')$, also für das Apparat-Profil, eine Dispersions-Funktion annimmt.
- Die maschinelle Auswertung eines Spektrums gemäß Gl (57) ist erheblich schneller.

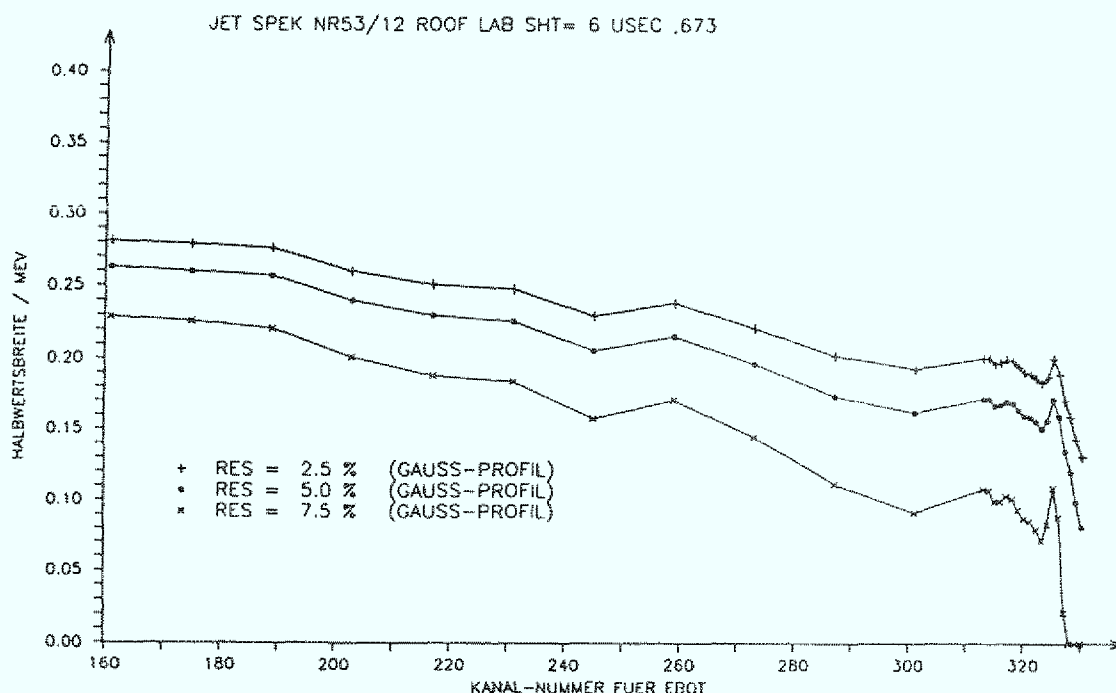


Fig. 13: Halbwertsbreite der 2,45 MeV - Linie
in Abhängigkeit vom Bereich der
verwendeten Zählraten

2. Parameterstudie

Die Auswertung erfolgte gemäß Gl (57)

Daten: - Counts from Analyser (s. Fig. 9a)
NEBOT = Kanal-Nummer für EBOT
- Apparate-Funktion
= Gauß-Profil mit
RES = 2.5 5.0 7.5 %

In einer zweiten Parameterstudie (Fig. 13) wurden ebenfalls die Zählraten der Fig. 9a, jetzt aber unter Verwendung der Gl (57) ausgewertet und die Halbwertsbreite der 2,45 MeV - Linie bestimmt. Diese Kurven sind - jedenfalls was ihren qualitativen Verlauf angeht - mit den drei oberen Kurven der Fig. 12 vergleichbar. Bemerkenswert erscheint der Bereich

NEBOT ≥ 310 . Die Schwankungen dort dürften allein auf die Streuungen in den Zählraten in unmittelbarer Umgebung der Linie zurückzuführen sein. Es wurden in diesem Gebiet nur die Zählraten derjenigen Kanäle ausgewertet, die symmetrisch zur Kanalnummer der Linie (das ist die Kanalnummer 337) liegen. Die Anzahl der jeweils verwendeten Analysator-Kanäle beträgt dort $2 \cdot (337 - \text{NEBOT}) + 1$, im Falle NEBOT = 330 sind es also 15 Kanäle. Im Prinzip kann man natürlich die Anzahl der Kanäle, die für die Bestimmung der Linienbreite herangezogen werden, noch weiter verringern. Das wurde hier nicht getan; es ist auch fraglich, ob das wegen der Streuung der Zählraten noch sinnvoll ist. Bemerkenswert bleibt die Tatsache, daß die Breite des Apparate-Profiles einen außerordentlich großen Einfluß auf die berechnete Linienbreite hat.

Der Einfluß der Zählratenschwankungen auf die Entfaltung wurde noch in einer 3. Parameterstudie untersucht, bei der - im Unterschied zur 2. Parameterstudie, Fig. 13 - die *geglätteten* Zählraten ausgewertet wurden. Daß die Glättung der Zählraten zu "besseren" Ergebnissen führt, hat sich schon anfangs bei den Fig. 1 bis 4 gezeigt. Fig. 14a enthält neben den Zählraten der Fig. 9a ("COUNTS FROM ANALYSER") auch die *geglätteten* Zählraten ("COUNTS AFTER SMOOTHING"), die - jedenfalls in dem interessierenden Bereich zwischen den Kanalnummern 310 bis 360 - einen sehr glatten Verlauf zeigen. Bei der Glättung wurde das von BENJAMIN, KEMSHALL und BRISTOCK [3] angegebene Programm benutzt, das das Auflösungsvermögen des Zählers verwendet; es wurde RES = 2,5 % angenommen. Die Kurven der Fig. 14b entsprechen denen von Fig. 13, sie zeigen erwartungsgemäß einen glatteren Verlauf. Allerdings sind die berechneten Halbwertsbreiten größer als diejenigen, die man aus den ungeglätteten Zählraten erhält. Das ist verständlich. Die Glättung bewirkt eine gewisse Abflachung im Verlauf der Zählraten. Damit wird der Faktor A im Argument der erf-Funktion in Gl (57) kleiner, ebenfalls der Wert β in Gl (55). Wegen Gl (56) muß dann die Halbwertsbreite HWB größer werden. - Auf eine Inkonsistenz bei den beiden unteren Kurven für RES = 5 und 7,5 % muß hingewiesen werden. Auch sie wurden berechnet aus den mit RES = 2,5 % *geglätteten* Zählraten. Glättet man aber zuvor die Zählraten mit den entsprechenden Werten für RES (also 5 % für die zweite und 7,5 % für die dritte Kurve), dann erhält man unrealistisch große Halbwertsbreiten.

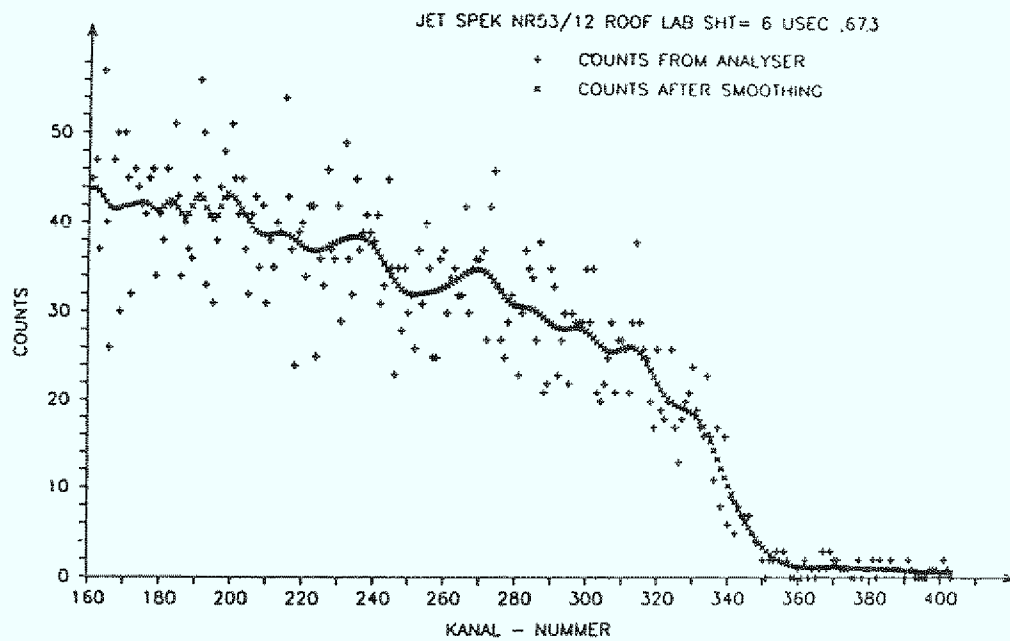


Fig. 14a: Zählraten vor und nach der Glättung

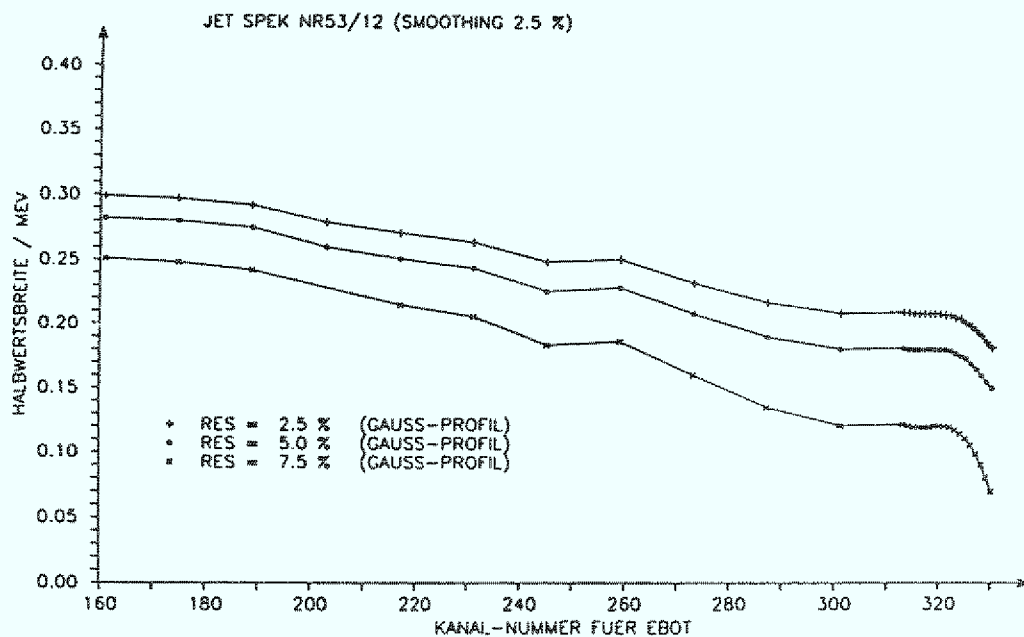


Fig. 14b: Aus den geglätteten Zählraten berechnete
Halbwertsbreiten in Abhängigkeit vom
Bereich der verwendeten Zählraten

Fig. 14: Einfluß der Glättung der Zählraten auf die
berechnete Halbwertsbreite der 2,45 MeV-Linie
(3. Parameterstudie)

3.5 Back Bias

G1 (1) beschreibt die Abbildung einer Funktion $f(x')$, die über einer Punktmenge $\{x'\}$ definiert ist, in eine Funktion $g(x)$, die über einer Punktmenge $\{x\}$ definiert ist. Die Entfaltung von Spektren, also die Bestimmung von $f(x')$ aus den Meßwerten $g(x)$, besteht dann darin, diese Abbildung umzukehren. Das setzt voraus, daß man die Abbildung von $\{x'\}$ in $\{x\}$ kennt.¹¹ In diesem Sinne gehörte dieser Abschnitt eigentlich an den Anfang des Berichtes. Bei den Fig. 1 - 4 wurde zwar schon auf den Eich-Peak in den Zählraten hingewiesen, der für die Zuordnung der Energie zu den Kanalnummern verwendet wird. Das reicht für eine korrekte Beschreibung dieser Abbildung natürlich auch dann nicht aus, wenn man sich vorher durch sorgfältige Eich-Messungen davon überzeugt hat, daß die Meßapparatur eine lineare Kennlinie besitzt, also eine lineare Abbildung vermittelt. Eine lineare Abbildung ist erst durch eine Zwei-Punkte-Eichung festgelegt. Das macht also zwei Eich-Peaks erforderlich, die sich natürlich im Zählratenspektrum niederschlagen und gegebenenfalls zu meßtechnischen Schwierigkeiten führen. (Dieses Verfahren wird deshalb in der Praxis anscheinend nicht angewendet).

Hat man zwei (Eich-) Strahler mit genau bestimmten Energien E_1 und E_2 und hinreichend schmalen Linienprofilen, die jeweils ein so schmales Zählratenspektrum liefern, daß den Energien E_1 und E_2 die Kanalnummern i_1 und i_2 gut zuzuordnen sind, dann gilt (wenn die Abbildung linear ist) für den Umrechnungs- oder Kalibrierungs-Faktor CAL

$$CAL = (E_1 - E_2) / (i_1 - i_2) \quad (58)$$

und für die Zuordnung einer beliebigen Energie E zu einer Kanalnummer i

$$E = E_1 - CAL \cdot i_1 + CAL \cdot i \quad (59)$$

¹¹ Die Abbildung muß natürlich umkehrbar und eindeutig, und sie sollte linear sein. Beispielsweise kann man mit einem Geiger-Müller-Zähler keine Spektroskopie betreiben, - das Energiespektrum $\{x'\}$ wird in nur einen einzigen "Kanal" abgebildet, die Menge $\{x\}$ besteht nur aus einem Punkt. Die Abbildung $\{x\} \Rightarrow \{x'\}$ ist dann eo ipso unmöglich.

Für $E = 0$ erhält man daraus den "Überhang" (BIAS) an Kanalnummern

$$i = \text{IBIAS} = i_1 - E_1/\text{CAL} \quad (60)$$

und für $i = 0$ den Überhang in Energie-Einheiten

$$E = \text{BBIAS} = E_1 - \text{CAL} \cdot i_1 \quad (61)$$

Der Ausdruck für BBIAS wird auch "BACK BIAS" genannt. Es ist

$$\text{BBIAS} = - \text{CAL} \cdot \text{IBIAS} \quad (62)$$

Für die Umrechnung von Energie-Einheiten in Kanalnummern gilt also

$$E = i \cdot \text{CAL} + \text{BBIAS} \quad (63)$$

beziehungsweise

$$i = E / \text{CAL} + \text{IBIAS} \quad (64)$$

Ein Beispiel mag die Bedeutung einer solchen Nullpunktverschiebung verdeutlichen. Sei $E_1 = 0,765$ MeV und die zugehörige, gemessene Kanalnummer $i_1 = 100$. Ohne einen weiteren Eichpeak würde man die Kalibrierung zu $\text{CAL} = E_1/i_1 = 0,00765$ und (wegen fehlender weiterer Information) $\text{IBIAS} = 0$ ansetzen. Der 2,45 MeV-Linie entspräche dann die Kanalnummer 320. Die Entfaltung führt aber zu einem Strahlungsmaximum bei etwa Kanalnummer 337 (mit einer Unsicherheit von abgerundet ± 1 Kanal), was einer Energie von 2,58 MeV entspricht. Geht man mit diesen zusätzlichen Informationen ($E_2 = 2,45$ MeV, $i_2 = 337$) in die obigen Gleichungen ein, dann erhält man $\text{CAL} = 0,00711$ und $\text{IBIAS} = -8$.

Solche Korrekturen an der Kalibrierung sind natürlich nur möglich, wenn zwei Eichpeaks zur Verfügung stehen oder die auszumessende Linie selbst zur Eichung verwendet werden kann.

Die Gln (60), (62) und (64) geben einen Hinweis auf die Genauigkeit der Abbildung, denn die Kanalnummern sind ganze (INTEGER-) Zahlen, die sich aus den genannten Gleichungen nur durch Abrundung darstellen lassen.

In der Praxis sind die Zusammenhänge etwas komplexer. Nicht nur die berechnete Halbwertsbreite der Linie, sondern auch die berechnete Lage des Linienmaximums hängt von den Zählraten und deren Streuungen ab. Die in dem Zahlenbeispiel angegebene Zuordnung der Energie 2,45 MeV zum Kanal 337 gilt nur für einen bestimmten Bereich von Zählraten (dann allerdings mit großer Genauigkeit). Man erkennt das, wenn man für die Lage des Linienmaximums ähnliche Parameterstudien durchführt, wie für die Halbwertsbreite der Linie. Setzt man in Gl (57) $S = q(1)$, die über Gl (55) in A enthaltene, unbekannte Größe $\beta = q(2)$ und die Energie der Linie $x_0 = q(3)$, dann erhält man mit der Methode der kleinsten Quadrate solche Werte für diese $q(1)$, $q(2)$ und $q(3)$, daß sich die durch Gl (57) gegebene Funktion optimal an die Zählraten anpaßt. In Fig. 15 ist das Ergebnis solcher Rechnungen dargestellt. Die für die verschiedenen Zählratenbereiche berechneten Werte für die Lage des Linienmaximums, das ist dort die Kurve für $Q(3)$, variieren zwischen 2,43 und 2,485 MeV. Sie liegen also bis zu 20 keV (das entspricht etwa 3 Kanälen) unter beziehungsweise bis zu 35 keV (das entspricht etwa 5 Kanälen) über dem Sollwert von 2,45 MeV. Dem entsprechen die oben genannten Werte für CAL und IBIAS; die Unsicherheit hierfür ist aber jedenfalls größer als oben angegeben.

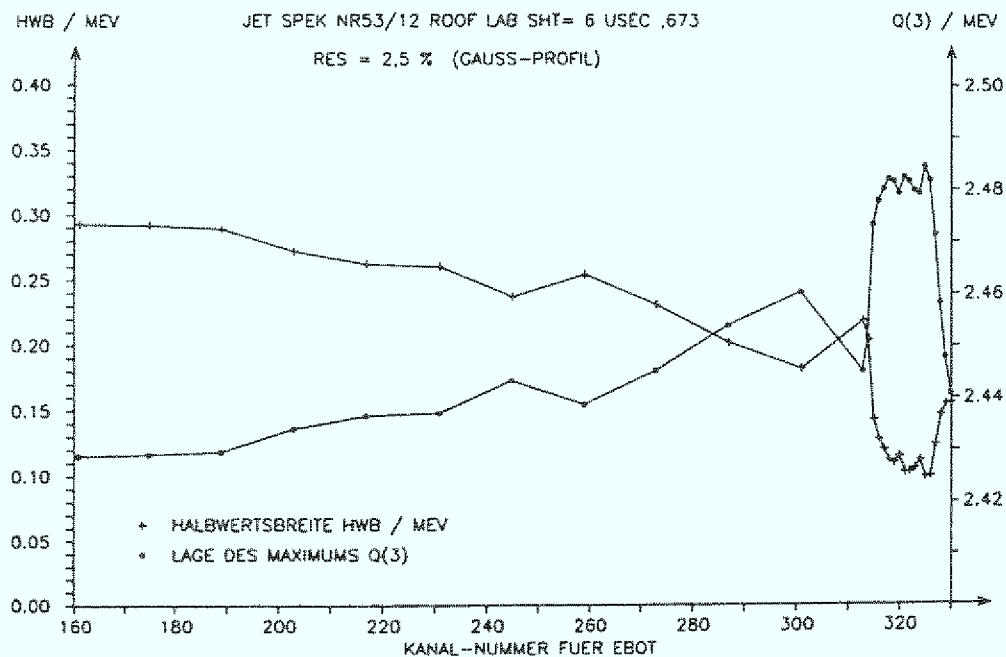


Fig. 15: Berechnete Lage des Linienmaximums $Q(3) = x_0$ in Abhängigkeit vom Bereich der verwendeten Zählraten

4. Zusammenfassung

Zur Methode der kleinsten Quadrate:

- Die Methode der kleinsten Quadrate ist ein sehr allgemein anwendbares Hilfsmittel zur Lösung zahlreicher Ausgleichsprobleme. Das gilt ohne Einschränkung auch für den hier betrachteten Fall, daß die zu bestimmenden Koeffizienten in nicht-linearer Weise in die gesuchte Funktion eingehen, für die *Non Linear Least Square* - Methode.
- Für die maschinelle Berechnung gibt es gut ausgearbeitete Routinen. Für kleinere Rechner lassen sie sich leicht in platzsparender Weise programmieren.
- Die Summe der Quadrate (der Abweichungen der Meßwerte vom "Mittelwert", zum Beispiel von einer vorgegebenen Funktion) gibt in jedem Falle eine Aussage über die Genauigkeit der Auswertung.

Zur Entfaltung von Kontinuum-Strahlung:

- Für die Entfaltung einer Kontinuum-Strahlung muß gefordert werden, daß die berechneten Strahlungsstärken $s(k)$ nicht negativ sind, daß also $s(k) \geq 0$ für alle k gilt. Das in Abschnitt 2.3 beschriebene Verfahren garantiert, daß diese Forderung erfüllt ist.
- Das Verfahren kann verwendet werden, um die Frage zu entscheiden, ob *im Bereich des Zählers* eine Linienstrahlung vorliegt oder nicht.

Zur Entfaltung von Linien-Strahlung:

- Bei der Entfaltung einer Linienstrahlung muß die Form dieser Linie vorgegeben sein; es muß eine Funktion $s(x;q)$ existieren mit den Parametern $q = (q_1, \dots, q_n)$, durch die die Strahlungsstärken beschrieben werden. Die q_i sind zu bestimmen. Die Funktion $f(x')$ im Faltungsintegral Gl (1) ist dann gegeben in der Form $f(x', s(q))$.

- Hier sind zwei Fälle zu unterscheiden:

- (a) Das Faltungsintegral Gl (1) läßt sich nicht geschlossen integrieren, und es gelingt auch nicht, einen analytischen Ausdruck als hinreichend gute Approximation für dieses Integral anzugeben.

Dieser Fall ist in Abschnitt 2.2 abgehandelt. Er ist relativ aufwendig. Außerdem erfordert er - und darauf muß besonders hingewiesen werden - eine passende Wahl der Referenzlinien für das Linienprofil. Wenn sich auch dieses System der Referenzlinien in einfacher Weise konstruieren läßt, so sind doch zusätzliche Überlegungen und mitunter auch vergleichende Rechnungen unumgänglich.

- (b) Das Faltungsintegral Gl (1) läßt sich formal geschlossen integrieren und ergibt einen Ausdruck der Form $F(x, s(q))$.

Das ist der unbedingt anzustrebende Fall; er ist einfach in der Handhabung und schnell in der maschinellen Ausführung. Insbesondere erhält man bei größeren Streuungen der Meßwerte auch schnell eine Übersicht über die dadurch bedingten Schwankungen der berechneten Parameter wie Linienbreite, Amplitude und Lage des Strahlungsmaximums.

Die in diesem Bericht (Abschnitt 3.4) verwendete Funktion $F(x, s(q))$ stellt sicher nur eine grobe Näherung dar. Auf diese Vereinfachungen wurde hingewiesen. Man kann aber, wie aus den dortigen Darlegungen zu ersehen ist, diese Approximation Schritt für Schritt verbessern und so - wenn geeignete Messungen zum Vergleich vorliegen - zu einer für die Praxis hinreichenden Darstellung kommen.

Zum Problem der Apparate- oder Response-Funktion:

- Bei der Entfaltung von Spektren spielt die Response- oder Apparate-Funktion, also die Funktion $R(x'-x)$ in Gl (1), eine zentrale Rolle, - und zwar unabhängig davon, welches Verfahren zur Entfaltung verwendet wird. Es wurde in der Einleitung (S. 1) darauf hingewiesen, daß man unter Verwendung einer sehr schmalen Linienstrahlung der Energie x_0

diese Apparate-Funktion *in der Umgebung von x_0* experimentell bestimmen kann (wie das in der optischen Spektroskopie bekanntlich getan wird).

- In der Spektroskopie von Kernstrahlungen verfügt man nur bedingt über so hinreichend schmale Linienprofile, wie sie für solche Eichungen erforderlich sind. Da die Funktionen $R(x'-x)$ und $f(x')$ in Gl (1) "gleichberechtigt" sind (man erkennt das unmittelbar, wenn man dort die Substitution $t = x' - x$ durchführt), kann man statt der Funktion $f(x')$ die Apparate-Funktion bestimmen. Das setzt natürlich eine genaue Kenntnis des Strahlungsprofils $f(x')$ und hinreichend gute Messungen der $g(x)$ voraus. Die Methode der kleinsten Quadrate gestattet dann eine Aussage über die Genauigkeit, mit der die Apparate-Funktion *in einem gewissen Energiebereich* approximiert wurde.
- Wie stark neben der *Breite* der Apparate-Funktion auch ihre *Form* das Ergebnis der Entfaltung beeinflusst, zeigt sich bei den Parameterstudien über die Bestimmung der Linienbreite (Abschnitt 3.4.3).

Literaturverzeichnis

- [1] A. Unsöld
Physik der Sternatmosphären
Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg
Zweite Auflage, 1955

- [2] J. Abadie (Edit.)
Nonlinear Programming
North-Holland Publishing Company - Amsterdam (1967)

Hier insbesondere die Beiträge
P. Wolfe: Methods of Nonlinear Programming (p. 97 - 131)
E. M. L. Beale: Numerical Methods (p. 133 - 205)

- [3] P. W. Benjamin, C. D. Kemshall, A. Bristock
The Analysis of Recoil Proton Spectra
AWRE Report No. 09/68, (1968)

- [4] N. L. Snidow
Wall Effect Corrections in Recoil Proton Spectrometers
Spherical Counter
BAW-TM-442, Babcock and Wilcox, (1965)

- [5] M. Abramowitz, I. A. Stegun (Edit.)
Handbook of Mathematical Functions
Dover Publications, Inc., New York (1965)

- [6] F. Hoenen
Spherical Ionization Chambers with Improved Energy Resolution
for Neutron Spectroscopy
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research,
223 (1984), p. 150 - 154

Wir danken den Herrn Dr. P. Bogen, Dr. H. Kever und Dr. J. Schlüter für viele hilfreiche Anregungen und kritische Diskussionen über experimentelle und theoretische Aspekte der Spektroskopie, die sie uns bei der Bearbeitung der hier abgehandelten Problematik haben zukommen lassen.

Herr F. Hoenen hat uns freundlicherweise zahlreiche der von ihm gemessenen Spektren zur Verfügung gestellt, an denen die beschriebenen Methoden erarbeitet und getestet werden konnten. Dafür sind wir ihm unseren Dank schuldig.

