

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фано У., Спенсер Л., Бергер М. Перенос гамма-излучения. М., Госатомиздат, 1963.
 2. Золотухин В. Г. и др. В сб.: Вопросы дозиметрии

и защиты от излучений. Вып. 11. М., Атомиздат, 1970, с. 95.
 3. Огневский В. И. ЖЭТФ, 1955, т. 29, с. 454.
 4. Гольдштейн Г., Уилкинс Д. В сб.: Защита транспортных установок с ядерным двигателем. М., Изд-во иностр. лит., 1961, с. 212.

Об одном способе количественного определения химических элементов в многокомпонентных образцах с помощью фотонейтронного анализа

ГУТИЙ А. И., МЕЛЬНИЧЕНКО Д. П., МАЗЮКЕВИЧ Н. П., ПАРЛАГ А. М., ШКОДА-УЛЬЯНОВ В. А.

УДК 543.53:518.6

При решении ряда промышленных задач требуется определить содержание химических элементов в исследуемых образцах, не разрушая их, когда физические свойства компонентов очень близки.

Цель настоящей работы (в развитие работ [1, 2]) — проверить возможность применения устойчивого метода количественного анализа многокомпонентных смесей по выходу фотонейтронов, определяемому экспериментально с некоторой погрешностью.

Для этого выбраны, с одной стороны, схема измерения выходов фотонейтронов на бетатроне, предложенная О. В. Богданкевичем [3], и, с другой, математический аппарат для решения некоторых некорректно поставленных задач, впервые предложенный А. Н. Тихоновым [4] и впоследствии успешно развитый в работах В. Г. Шевченко и др. для определения сечения фотоядерных реакций.

Допустим, что образец содержит химические элементы Z_1, Z_2, \dots, Z_k , для которых известны выходы фотонейтронов $Y_i(E)$ ($i = 1, 2, \dots, k$) в некотором интервале энергии, отнесенные к единице веса и единице тока ускорителя. Пусть толщина образца такова, что в нем практически отсутствует поглощение первичного пучка γ -квантов. В силу этого имеем уравнение

$$p_1 Y_1(E) + p_2 Y_2(E) + \dots + p_k Y_k(E) = Y(E), \quad (1)$$

где p_1, p_2, \dots, p_k — веса соответствующих химических элементов Z_i в образце весом p , которые подлежат определению; $Y(E)$ — выход фотонейтронов из образца,

причем $\sum_{i=1}^k p_i = p$.

С учетом того что выходы фотонейтронов практически определяются в точечных значениях энергии E_n , количество которых в общем случае больше числа неизвестных p_1, p_2, \dots, p_k , получаем переопределенную систему алгебраических уравнений. Уравнение (1) представим в виде:

$$A\bar{p} = \bar{Y}, \quad (2)$$

где $\bar{p} = \{p_1, p_2, \dots, p_k\}$, $\bar{Y} = \{Y(E_1), Y(E_2), \dots, Y(E_n)\}$;

$$A = \begin{bmatrix} Y_1(E_1) & Y_2(E_1) & \dots & Y_k(E_1) \\ Y_1(E_2) & Y_2(E_2) & \dots & Y_k(E_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ Y_1(E_n) & Y_2(E_n) & \dots & Y_k(E_n) \end{bmatrix} \quad (n > k).$$

Так как экспериментально измеренным значениям свойств статистический разброс, можно рассматривать не одно, а целое семейство возможных решений (назовем их формальными), удовлетворяющих уравнению (1).

Вообще говоря, нахождение решения \tilde{p} из уравнений (2) по известным выходам фотонейтронов $Y_i(E)$, $Y(E)$ — задача неустойчивая, т. е. произвольно малые отклонения в $Y_1(E)$, $Y(E)$, находящиеся в пределах статистической точности, могут вызвать большие (в ряде случаев как угодно большие) изменения в p .

Методы построения приближенного решения определяются при помощи дополнительных требований, которые ограничивают класс решений теми из них, при которых метод устойчив. Эти требования состоят в том, что из множества формальных решений извлекается подмножество, которое будет компактным, т. е. таким, что из всякой последовательности $\{p_n\}$ этого множества можно выбрать сходящуюся подпоследовательность, пределом которой есть элемент [в нашем случае истинное решение p системы (2)] того же множества [5].

Нахождение некоторого параметризованного семейства решений задачи по методу регуляризации можно свести к нахождению абсолютного минимума следующего сглаживающего функционала [4]:

$$M^\alpha(p) = \left\| \frac{1}{\sqrt{Y}} (A\bar{p} - \bar{Y}) \right\| + \alpha \|\bar{p}\|^2, \quad (3)$$

где $\frac{1}{\sqrt{Y}}$ — весовая функция; первый функционал (3)

оценивает точность удовлетворения уравнению на заданном интервале энергии $E_1 - E_n$, второй — «сложность» приближения на нем. Параметр $\alpha > 0$ зависит от точности измерений и связывает с ней степень сложности приближения.

Верхнюю границу измерения параметра регуляризации α определим из условия, что будем находить такое max α , для которого решение \tilde{p}^α удовлетворяет требованию

$$|A\tilde{p}^\alpha - \bar{Y}| \leq \delta\bar{Y},$$

где $\delta\bar{Y}$ — среднеквадратическое отклонение суммы случайных величин $Y_i(E)$, $Y(E)$ ($i = 1, 2, \dots, k$).

Как отмечено в работе [6], $\tilde{p}^\alpha \rightarrow p$ при $\frac{\delta\bar{Y}}{Y} \rightarrow 0$.

Квазиоптимальным приближением \tilde{p} будет то решение \tilde{p}^α , при котором α удовлетворяет условию:

$$\min_{\alpha} v(\alpha) \approx \min_{\alpha} \frac{\|\tilde{p}^{\alpha n-1} - \tilde{p}^{\alpha n}\|}{\Delta\alpha_n}$$

Для эксперимента в качестве исследуемого образца выбрано сочетание тонких пластин рения и вольфрама (до 20% рения) с известными весами этих компонентов (веса определялись взвешиванием). Такой образец в качестве сплава перспективен для электровакуумной промышленности и изготовления высокотемпературных терморпар (до 2500°С).

Надо отметить, что эта смесь выбрана специально, так как Z для вольфрама и рения равен 74 и 75, а пороги (γ, n)-реакций равны 7,46 и 7,39 Мэв соответственно. Кроме того, близки выходы и сечения (γ, n)-реакций на этих элементах, что связано с их близкими атомными весами.

Выходы фотонейтронов получены на бетатроне БУ-25/30 с интенсивностью 30 р/мин на расстоянии 1 м от мишени многоканальным методом [3] в интервале энергий 6—21 Мэв и с энергетическим шагом $\Delta E_\gamma = 100$ кэв. При этом генератор опорного напряжения и вспомогательное устройство, осуществляющее сканирование энергии ускорителя, позволяли поддерживать максимальную энергию в спектре тормозного излучения с точностью до 0,5%.

Выберем три значения энергии, соответствующие, например, 92-, 102-, 112-му номерам каналов анализатора. Для них уравнение (1) представляется системой (выходы взяты в относительных единицах)

$$\begin{aligned} 0,80p_1 + 0,90p_2 &= 32,0; & 1,20p_1 + 1,49p_2 &= 47,0; \\ 1,65p_1 + 2,03p_2 &= 59,9, \end{aligned} \quad (4)$$

где p_1 — вес вольфрама; p_2 — вес рения; $Y_1 = \{0,80; 1,20; 1,65\}$ — выход фотонейтронов вольфрама в 92-, 102-, 112-м каналах на единицу веса; $Y_2 = \{0,90; 1,49; 2,03\}$ — выход фотонейтронов рения в 92-, 102-, 112-м каналах на единицу веса; $Y = \{32,0; 47,0; 59,9\}$ — выход фотонейтронов из смеси вольфрама и рения.

Следует отметить, что относительное отклонение правой и левой частей системы (4) при подстановке в нее истинного решения, определенного путем взвешивания ($p_1 = 28,35$; $p_2 = 7,030$), равно 10; 5,6; 1,9% для 92-, 102-, 112-го канала анализатора соответственно, но и эти отклонения лежат в пределах величины $\frac{\delta Y}{Y}$.

В таблице приведены параметрические решения системы (4) методом регуляризации при некоторых параметрах регуляризации α . Как следует из этих данных, квазиоптимальное решение соответствует решению \tilde{p}^α при $\alpha_{\text{квазиопт}} = 0,155 \cdot 10^{-3}$. При этом полученные значения $p_1 = 29,15$; $p_2 = 7,189$ есть величины, в среднем наименее отклоняющиеся от взвешенных $p_1 = 28,35$ и $p_2 = 7,03$, причем отклонение составляет $\delta p_1 = 2,82\%$; $\delta p_2 = 2,26\%$.

Зависимость решения задачи от параметра регуляризации α

α	\tilde{p}^α		$v(\alpha)$
	p_1^α	p_2^α	
0,000	63,08	-20,77	
0,00005	42,26	-3,61	26,9
0,0001	33,84	3,33	21,78
0,00013	30,95	5,72	16,20
0,00015	29,48	6,92	14,21
0,000152	29,20	7,08	20,97
0,000155	29,15	7,189	7,49
0,000157	28,96	7,348	22,61
0,00016	28,79	7,456	10,77
0,00017	28,29	7,90	11,08
0,0002	26,84	9,09	12,47
0,0003	23,63	11,275	12,45

Для $\alpha = 0$ уравнение (3) решается методом наименьших квадратов, который к кругу некорректно поставленных задач непригоден. О его неустойчивости при их решении свидетельствует то, что решение $p_1 = 63,08$; $p_2 = -20,77$, соответствующее $\alpha = 0$, лишено физического смысла.

Описанный в настоящей работе метод опробован и дал хорошие результаты для сплава, состоящего из компонентов тантала, вольфрама и рения, который используется для изготовления нагревательных промышленных печей и тепловых экранов космических кораблей.

При определении количества составляющих в двухкомпонентном сплаве вольфрам + рений не ставилась цель достичь высокой экспрессности, характерной для методик с сильноточными пучками. Однако метод анализа даже на слаботочных ускорителях будет экспрессным по сравнению с существующим в настоящее время, не говоря уже о том, что он является бездеструктивным.

Поступило в Редакцию 13/VIII 1973 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шкода-Ульянов В. А. и др. «Бюл. изобрет.», 1964, вып. 13, с. 72.
2. Парлаг А. М. и др. «Атомная энергия», 1963, т. 15, вып. 2, с. 146.
3. Богданкевич О. В. «Атомная энергия», 1962, т. 12, вып. 3, с. 198.
4. Тихонов А. Н. «Докл. АН СССР», 1963, т. 151, с. 501; т. 153, с. 49.
5. Тихонов А. Н. «Докл. АН СССР», 1973, т. 39, с. 195.
6. Тихонов А. Н. В сб.: Вычислительные методы и программирование. Вып. VIII, М., изд. МГУ, 1967, с. 3.