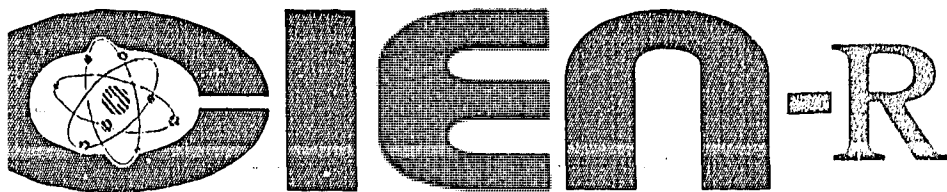


CU 9600398



CONVULSION DE ESPECTROS DE TIEMPO DE VIDA DE
POSITRONES

CONVULSION OF POSITRONS' LIFETIME SPECTRA

Calderin Hidalgo, L.; Ortega Villafuerte, Y.

Centro de Estudios Aplicados al Desarrollo Nuclear
(CEADEN) La Habana, Cuba

La Habana, Cuba

DECONVOLUCIÓN DE ESPECTROS DE TIEMPOS DE VIDA DE POSITRONES

DECONVOLUTION OF POSITRONS' LIFETIME SPECTRA

Calderín Hidalgo, L.; Ortega Villafuerte, Y.

Centro de Estudios Aplicados al Desarrollo Nuclear (CEADEN).

La Habana.

Cuba.

1996.

Subject Categories : G24.30

Key words : POSITRONS :Q1, SPECTRA UNFOLDING :M1, LIFETIME, DOPPLER BROADENING, ITERATIVE METHODS.

RESUMEN

En este trabajo se fundamenta el método iterativo desarrollado anteriormente para la deconvolución de espectros de ensanchamiento Doppler, a partir de la teoría de la optimización matemática. Además se inicia la adaptación y aplicación del mismo a la deconvolución de espectros de tiempo de vida de positrones.

ABSTRACT

In this paper, we explain the iterative method previously developed for the deconvolution of Doppler broadening spectra using the mathematical optimization theory. Also, we start the adaptation and application of this method to the deconvolution of positrons' lifetime annihilation spectra.

INTRODUCCIÓN

Las técnicas de aniquilación de positrones son de amplio uso en el estudio y control de materiales [1-4]. La más popular de ellas es la medición de ensanchamiento Doppler por la economía en tiempo y recursos que representa [5-7]. Una cuestión importante en cualquiera de las variantes de estas técnicas, es el procesamiento de datos específicamente, en el caso de ensanchamiento Doppler se han desarrollado diferentes métodos de deconvolución [8-10], el más reciente de ellos se basa en una nueva técnica iterativa [11].

En este trabajo se justifica, desde el punto de vista de la teoría de la optimización matemática, el último método iterativo desarrollado [11]. Además este método es utilizado en la deconvolución de espectros de tiempo de vida.

La principal ventaja del método con respecto a los anteriormente desarrollados [8-10], es que no depende de un modelo físico para la interpretación del espectro.

MÉTODO.

El espectro sin ruido se describe de la siguiente forma:

$$\mu = R/U \quad (1)$$

donde:

U es el espectro real.

R es la función resolución del espectrómetro.

Ahora μ y por lo tanto U minimiza la expresión para χ^2 correspondiente:

$$\chi^2(l) = \sum_{i=1}^n \frac{(E_i - \mu_i(l))^2}{\sigma_i^2} \quad (2)$$

donde E es el espectro medido y σ la varianza correspondiente.

De la expresión (2) pueden definirse tres funcionales:

1) Teniendo en cuenta la dependencia de σ de μ :

$$f_1(l) = \sum_{i=1}^n \frac{(E_i - \mu_i(l))^2}{\mu_i(l)} \quad (3)$$

2) Tomando σ como a partir del espectro medido (forma en la que se trabaja normalmente en problemas de ajuste con estadística poissonica):

$$f_1(U) = \sum_{i=1}^n \frac{(E_i - \mu_i(U))^2}{E_i} \quad (4)$$

3) Suponiendo σ constante para todos los canales:

$$f_3(U) = \sum_{i=1}^n (E_i - \mu_i(U))^2 \quad (5)$$

La componente 1 del gradiente de cada uno de estos funcionales viene dada por las siguientes expresiones:

$$\nabla_1 f_1(U) = \sum_i \left(1 - \frac{E_i^2}{\mu_i^2} \right) R_{ii} \quad (6)$$

$$\nabla_1 f_2(U) = -2 \sum_i \frac{(E_i - \mu_i(U))}{E_i} R_{ii} \quad (7)$$

$$\nabla_1 f_3(U) = -2 \sum_{i=1}^n (E_i - \mu_i(U)) R_{ii} \quad (8)$$

Las expresiones para los Hessianos son:

$$\frac{\partial^2 f_1(U)}{\partial U_i \partial U_i} = 2 \sum_{i=1}^n \frac{E_i^3}{\mu_i^3(U)} R_{ii} R_{ii} \quad (9)$$

$$\frac{\partial^2 f_2(U)}{\partial U_i \partial U_i} = 2 \sum_{i=1}^n \frac{R_{ii} R_{ii}}{E_i} \quad (10)$$

$$\frac{\partial^2 f_3(U)}{\partial U_i \partial U_i} = 2 \sum_{i=1}^n R_{ii} R_{ii} \quad (11)$$

De las que puede verse que el punto que satisface la condición de extremo (gradiente nulo para cada funcional), es un punto de mínimo pues al ser todas las magnitudes involucradas positivas y los elementos de la diagonal principal de R no nulos, el Hessiano es definido positivo [12].

Para la minimización de cualquiera de los funcionales construidos, es necesario definir una dirección P de búsqueda, encontrar el mínimo según la misma, una vez encontrado, cambiar de dirección, encontrar el mínimo según la nueva dirección definida, repitiendo este proceso hasta que se obtenga la precisión deseada.

Fundamentación del algoritmo empleado para la deconvolución de espectros de ensanchamiento Doppler.

A partir del primer trabajo que desarrollamos sobre el tema [11] y la teoría de la optimización matemática [13], puede probarse que P para la iteración k toma la forma:

$$\mu_i^{(k)} = \frac{(E_i - \mu_i^{(k)}(U^{(k)}))}{\mu_i^{(k)}(U^{(k)})} * U_i^{(k)} \quad (12)$$

De la Tabla No. 1 (ver anexo) puede verse que P define una dirección descendente de búsqueda [13], pues el producto ∇^*P puede escribirse en la forma $-xRTx$ donde la matriz RT es definida positiva para determinadas condiciones. La aproximación $k+1$ para U es:

$$U^{(k+1)} = U^{(k)} + \lambda U^{(k)} \quad (13)$$

donde λ minimiza el funcional según la dirección $P^{(k)}$. Esto presupone tener que resolver una ecuación trascendente para λ lo cual complica mucho el problema. Es aconsejable entonces utilizar algún método de búsqueda del mínimo en una dirección mediante ajustes de polinomios de segundo o tercer grado [13]. El método utilizado en [11] fue fijar λ en uno.

Deconvolución de espectros de tiempo de vida:

Las primeras pruebas realizadas con el algoritmo anterior para espectros de tiempo de vida de positrones no arrojó buenos resultados como se verá, por lo que es necesario encontrar otros métodos.

Los métodos que se vienen desarrollando se dividen en dos grupos:

1. Definición de nuevas direcciones de búsqueda para todos los funcionales.
2. Introducir métodos de direcciones conjugadas para el segundo y tercer funcional.

Las nuevas direcciones de búsqueda a utilizar se definen en la Tabla No. 2. En la misma se recogen las matriz de transformación T así como las restricciones a imponer para asegurar la búsqueda en direcciones descendentes para cada caso.

Tabla No. 2.

		P1	P2	P3
	$\nabla J(U)$	$(E_i - \mu_i^{(k)}) * \frac{U_j^{(k)}}{\mu_i^{(k)}}$	$\frac{E_i - \mu_i^{(k)}}{\mu_i^{(k)}}$	$E_i - \mu_i^{(k)^2}$
B1	$\sum_i \left(\frac{\mu_i^{(k)^2} - E_i^2}{\mu_i^{(k)^2}} \right) * R_{ij}$	$T_{ij} = \frac{\mu_i^{(k)} U_j^{(k)}}{\mu_j^{(k)} + E_j} \delta_{ij}$ $U_j^{(k)} > 0$	$T_{ij} = \frac{\mu_j^{(k)}}{\mu_j^{(k)} + E_j} \delta_{ij}$ $\mu_j^{(k)} > 0$	$T_{ij} = \frac{\mu_j^{(k)^2}}{\mu_j^{(k)} + E_j} \delta_{ij}$ $\mu_j^{(k)} > 0$
B2	$-2 \sum_i (E_i - \mu_i^{(k)}) * \frac{R_{ij}}{\mu_i^{(k)}}$	$T_{ij} = U_j^{(k)} \delta_{ij}$ $U_j^{(k)} > 0$	$T_{ij} = \delta_{ij}$	$T_{ij} = \mu_j^{(k)} \delta_{ij}$ $\mu_j^{(k)} > 0$
B3	$-2 \sum_i (E_i - \mu_i^{(k)}) R_{ij}$	$T_{ij} = \frac{U_j^{(k)}}{\mu_i^{(k)}} \delta_{ij}$ $U_j^{(k)} > 0$	$T_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{\mu_i^{(k)}}$ $\mu_i^{(k)} > 0$	$T_{ij} = \delta_{ij}$

La Tabla No. 3 define el resto de las direcciones probadas.

Tabla No. 3

P4	P5	P6	P7	P8
$(I_i^2 - \mu_i^{(k)2}) \frac{U^{(k)2}}{\mu_i^{(k)2}}$	$(I_i^2 - \mu_i^{(k)2}) \frac{U^{(k)}}{\mu_i^{(k)2}}$	$\frac{(I_i^2 - \mu_i^{(k)2})}{\mu_i^{(k)2}}$	$\frac{(I_i^2 - \mu_i^{(k)2})}{\mu_i^{(k)}}$	$(I_i^2 - \mu_i^{(k)2})$

Las direcciones conjugadas para los funcionales uno y dos se construyen según:

$$h^{(k+1)} = \rho^{(k+1)} + \beta^{(k+1)} h^{(k)} \quad (14)$$

siendo la aproximación k+1 para U:

$$U^{(k+1)} = U^{(k)} + \lambda^{(k)} h^{(k)} \quad (15)$$

λ y β se determinan de las condiciones:

$$g^{(k+1)} * h^{(k+1)} = 0 \quad (16)$$

$$g^{(k+1)} * h^{(k)} = 0$$

RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

Para ilustrar como trabaja el método desarrollado en [11], se simuló un espectro de ensanchamiento Doppler sin ruido y otro con ruido (ver tabla No.4).

Tabla No 4 Datos utilizados para simular el espectro de ensanchamiento Doppler.

Función real: Suma de una parábola invertida con una gaussiana.

Forma de línea	posición (canales)	semiancho (canales)	intensidad (%)
parábola invertida	39	12	20
gaussiana	39	20	80

Función de resolución: Gaussiana de 5 canales de semiancho.

Dichos espectros fueron deconvolucionados además utilizando la técnica de los gradientes conjugados [13] para tres funcionales : el de la forma cuadrática, el de ji-cuadrado y el de la suma de las diferencias al cuadrado (ver tabla No.1), con el objetivo de comparar los resultados.

De la figura.No.1 puede verse que la deconvolución de los espectros utilizando el método de los gradientes conjugados para el funcional de la forma cuadrática es quien únicamente compete con el método desarrollado en el caso en que no hay ruido estadístico en los datos .

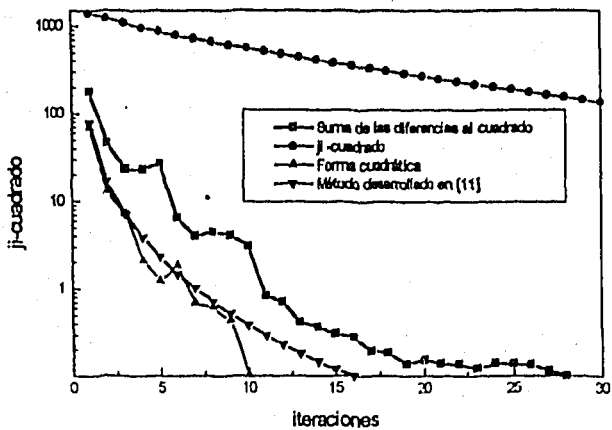


Figura No. 1

Ahora como bien muestran las figuras No.2 y No.3, el único que responde en caso de presencia de ruido estadístico con los datos es el desarrollado en este trabajo.

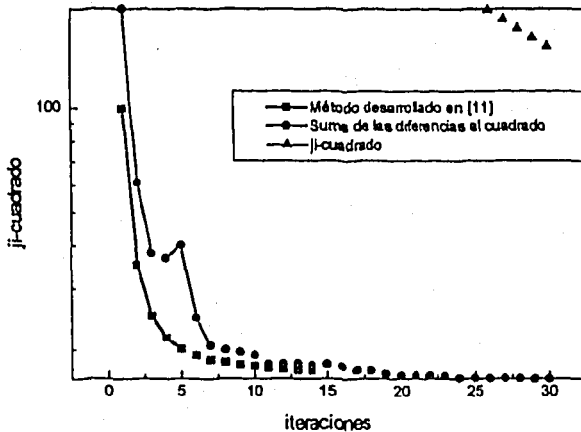


Figura No. 2

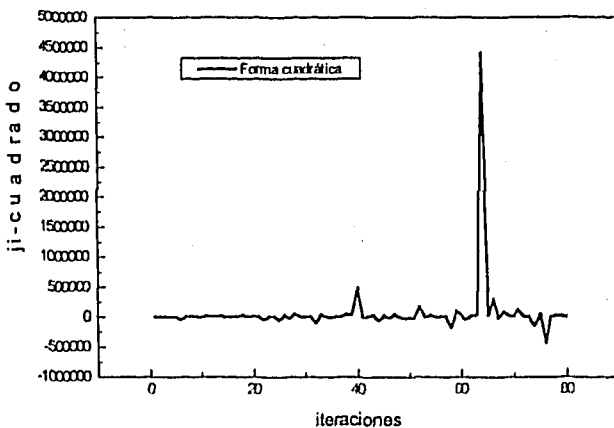


Figura No. 3

El método se utilizó también para la deconvolución de espectros de tiempo de vida de positrones. Para ello se simuló un espectro con las características que se resumen en la tabla No.5, con ruido y sin ruido estadístico.

Tabla No. 5 Datos utilizados para simular el espectro de tiempo de vida.

Función real: Suma de tres exponenciales decrecientes con los siguientes parámetros:

Componente	Tiempo de vida (ns)	Intensidad (%)
1	0.1756	93.87
2	0.2835	5.99
3	2.0	0.13

Función de Resolución:

Suma de tres gaussianas con los siguientes parámetros:

Gaussiana.	Semiancho (ns)	Intensidad (%)
1	0.2010	14.00
2	0.3050	14.00
3	0.2050	72.00

Los resultados fueron muy desalentadores como puede verse en un ejemplo de corrida en la figura No.4.

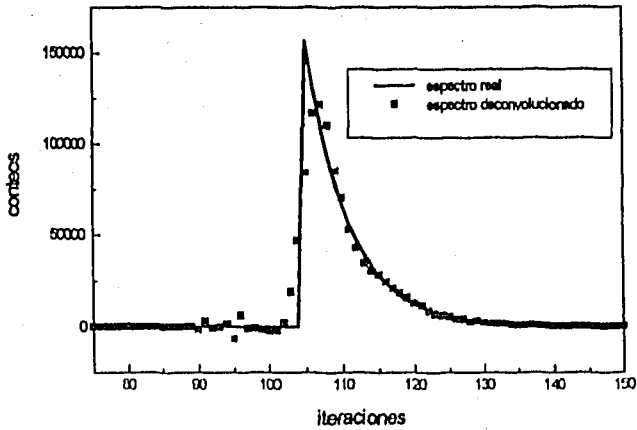


Figura No. 4

Esto ha obligado a continuar buscando nuevas direcciones o métodos de deconvolución, siendo los de mayores perspectivas los de direcciones conjugadas como puede juzgarse de la figura.No.5.

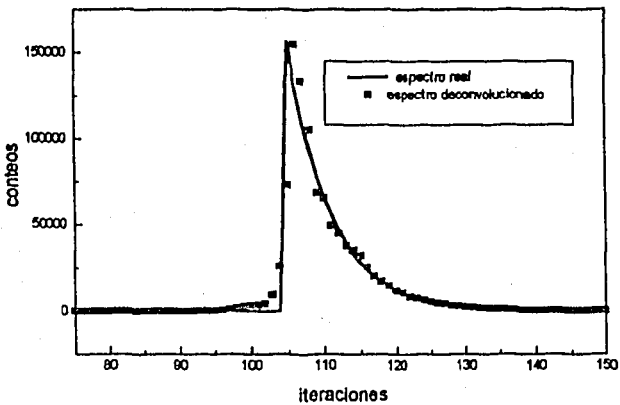


Figura No. 5

CONCLUSIONES

En el trabajo se da una fundamentación del método desarrollado en [11] desde el punto de vista de la teoría de la optimización matemática.

El método desarrollado muestra una conducta más favorable que el método de los gradientes conjugados cuando la data tiene ruido estadístico. En el caso de los espectros de ensanchamiento Doppler da muy buenos resultados no siendo así en el caso de tiempo de vida en que consume mucho tiempo y aparecen oscilaciones.

Esto nos ha obligado a continuar buscando nuevas vías para la deconvolución de los espectros de tiempo de vida y a partir de los primeros resultados obtenidos todo parece indicar que es necesario estudiar variantes de direcciones conjugadas.

BIBLIOGRAFÍA

1. Alfred Seeger and Florian Banhart. *Helvetica Physica Acta*. Vol.63 (1990)
2. A. J. Allen, C.F. Coleman, S. J. Conchie and F. A. Smith. *Mat. Res. Soc. Proc.* Vol 142, 1989. Materials Research Society.
3. M.Doyama. *Atomic Energy Review Supplement*. No.1 (1981)
4. Gerhard Brauer, Laszlo Liskay, Bela Molnar and Reinhard Krause. *Nuclear Engineering and Design* 127 (1991) 47-68.
5. G.Brauer, Z.S.Kajcos, T Kemény. *Positron Annihilation in Metallic Glasses-A General Survey*. Hungary. KFKI-1981-64.
6. P.Hautojärvi, A Vehaven. *Proceedings of an advisory group meeting*. San José, Costa Rica, 9-13. May. 1977.
7. J.L. Campbell. *Appl.Phys.* 13, 365-369 (1977).
8. Y.Kong and K.G.Lynn. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A302*. (1991) 145-149. North Holland.
9. D.T. Britton and Van Veen. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A275*. (1989) 387-391. North Holland.
10. D.T. Britton and P.C.Rice-Evans. *Phys. Stat. Sol* (6). 147,89 (1988).
11. Calderin L, Díaz J, Deconvolución de espectros de ensanchamiento Doppler. (por publicar).
12. Katriňák.T a kolektiv. *Algebra a teoretická aritmetika* (1). Bratislava. Alfa. 1985 .
13. Internet, *Mathematical Optimization*, 1994.

ANEXO

Tabla No. 1

No	Función	$U^{(k)}$	$g^{(k)}$	$\beta^{(k)}$	$h^{(k)}$	$\alpha^{(k)}$
1	$\frac{URU}{2} - E$	$U^{(k-1)} - \beta^{(k-1)} g^{(k-1)}$	$g^{(k-1)} - \beta^{(k-1)} R g^{(k-1)}$	$\frac{g^{(k)} h^{(k)}}{h^{(k)} R h^{(k)}}$	$g^{(k)} + \alpha^{(k-1)} h^{(k-1)}$	$-\frac{g^{(k-1)} R h^{(k)}}{g^{(k)} R h^{(k)}}$
2	$\sum_{i=1}^N \frac{(E_i - (RU)_i)^2}{(RU)_i}$. .	$\sum_{i=1}^N \left[\left[\frac{E_i}{(RU)_i} \right]^2 - 1 \right] R_i$	$\sum_{i,j=1}^N \left[\left[\frac{E_i}{(RU)_i \beta^{(k)} h^{(k)}} \right]^2 - 1 \right] P_{ij}^{(k)}$. .	
3	$\sum_{i=1}^N (E_i - (RU)_i)^2$. .	$\sum_{i=1}^N (E_i - (RU)_i) R_i$	$\frac{\sum_{i=1}^N (E_i - (RU)_i) R_i}{\sum_{i=1}^N (RU)_i R_i}$. .	

Los valores para comenzar la iteración son: $U^{(0)} = E$, $h^{(0)} = g^{(0)}$

1= Forma cuadrática

2= Ji-cuadrado

3=Suma de las diferencias al cuadrado.

Para el método desarrollado en [11]:

$$U_i^{(k)} = U_i^{(k-1)} - \frac{E_i}{(RU)^{(k-1)}_i}$$

Valores de comienzo:

$$U^{(0)} = E$$