

Регистрация данных осуществляется на НМЛ РТ-105-1 (производство ПНР), позволяющем записывать на одну МЛ до 20 Мбайт в формате ЕС ЭВМ с плотностью 8 или 32 бит/мм.

Большая потребность в системе автоматизации описанного типа обуславливает необходимость организации ее серийного выпуска.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бухаров М. Н., Выставкин А. Н., Моренков А. Д. и др. Использование микро-ЭВМ «Электроника-60» совместно с аппаратурой КАМАК в системах автоматизации экспериментов.— В кн.: Автоматизация научных исследований на основе применения ЭВМ. (Тезисы докладов.) Новосибирск, изд. ИАиЭ СО АН СССР, 1979.
2. Виноградов В. И. Дискретные информационные системы в научных исследованиях. М., Атомиздат, 1976.
3. Винниченко В. С., Олейников А. Я., Панкрац Е. В. и др. Автономное управление экспериментальным оборудованием, выполненным в стандарте КАМАК.— В кн.: Структура, технические средства и организация систем автоматизации научных исследований. (Материалы X Всесоюз. школы по автоматизации научных исследований.) Л., изд. ЛИЯФ, 1977.
4. Модули систем автоматизации научного эксперимента в стандарте КАМАК.— Каталог проспекта, М., изд. СКБ ИРЭ АН СССР, 1978.

Поступила в редакцию 14 июня 1979 г.

УДК 62-529 : 535.37

В. А. ГАЙСЛЕР, Э. Е. ДАГМАН, А. Р. КЛЯИН, А. С. ТЕРЕХОВ
(Новосибирск)

РАМАНОВСКИЙ СПЕКТРОМЕТР, УПРАВЛЯЕМЫЙ ЭВМ

В последние годы специализированные и универсальные микро- и мини-ЭВМ находят широкое применение при создании спектральных приборов. Использование ЭВМ улучшает основные параметры спектральной аппаратуры, резко сокращает затраты времени на регистрацию и обработку спектров, повышает точность и достоверность получаемых результатов. Анализ возможных применений ЭВМ в решении разнообразных спектроскопических задач и весьма обширная библиография по этому вопросу приведены в появившемся недавно обзоре [1].

В данной работе рассмотрено одно из типичных применений ЭВМ в спектроскопии — для выделения сигнала из шума. Для решения этой задачи возможны два режима работы спектрометра: многократное сканирование выбранного участка спектра и усреднение полученных результатов с помощью ЭВМ [2]; регулирование времени накопления τ сигнала в каждой точке выбранного участка спектра до достижения заданной оператором относительной ошибки δ_1 [3]. Эта ошибка носит случайный характер и обусловлена конечным отношением сигнал/шум (С/Ш) на выходе системы. Первый режим предъявляет высокие требования к механической системе развертки длин волн спектрометра, поскольку при повторных сканированиях должны совпадать длины волн, на которых измеряется сигнал. Кроме того, в данном режиме измерения величина δ_1 неодинакова для различных участков спектра, что является неудобным при количественном анализе формы линии.

Указанных недостатков лишен второй режим работы спектрометра, дополнительное преимущество которого состоит в возможности полной

оптимизации процесса регистрации спектра (под оптимальным здесь понимается такой режим регистрации, который позволяет измерить данный спектр с заданной точностью за минимальное время). Регулирование в этом режиме есть оптимизация одного из параметров процесса записи спектра. Полная оптимизация включает в себя автоматическое регулирование как величины τ , так и спектральной ширины щели S монохроматора и спектрального интервала h между двумя последовательно измеряемыми точками спектра. Регулирование S и h целесообразно, поскольку их значения определяются видом зависимости сигнала I от энергии фотона $\hbar\omega$ в данной точке спектра. Ясно, что оптимальные значения величин S и h связаны с крутизной спектра, и в тех его участках, где эта крутизна мала, S и h могут быть увеличены, и наоборот. Установим количественное соотношение между величиной систематической ошибки δ_2 , возникающей из-за недостаточного разрешения, и спектральной шириной щели. С этой целью рассмотрим соотношение, описывающее процесс регистрации спектра излучения неидеальным спектральным прибором [4]:

$$I(\hbar\omega_0) = \int_{-\infty}^{\infty} I_0(\hbar\omega) \Phi(|\hbar\omega - \hbar\omega_0|) d\hbar\omega, \quad (1)$$

где $I_0(\hbar\omega)$ — истинный спектр свечения, а $I(\hbar\omega_0)$ — его измеренное значение при $\hbar\omega = \hbar\omega_0$. Функция $\Phi(|\hbar\omega - \hbar\omega_0|)$ есть аппаратная функция спектрального прибора. Она имеет вид колокола с максимумом при $\hbar\omega = \hbar\omega_0$. Полуширина аппаратной функции равна спектральной ширине щели. Для вычисления δ_2 разложим $I_0(\hbar\omega)$ в ряд в окрестности точки $\hbar\omega_0$ и выполним почлененное интегрирование в (1). Интеграл от первого члена разложения дает $I_0(\hbar\omega_0)$. Интеграл от второго члена, пропорционального первой производной от $I_0(\hbar\omega)$, обращается в нуль из-за нечетности подынтегральной функции. По этой причине обращаются в нуль все слагаемые с нечетными производными. В результате имеем

$$I(\hbar\omega_0) = I_0(\hbar\omega_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \left. \frac{\partial^{2n} I_0}{\partial \hbar\omega^{2n}} \right|_{\hbar\omega=\hbar\omega_0} \int_{-\infty}^{\infty} (\hbar\omega - \hbar\omega_0)^{2n} \Phi(|\hbar\omega - \hbar\omega_0|) d\hbar\omega. \quad (2)$$

Если учесть, что δ_2 достаточно мала, то в (2) можно ограничиться двумя первыми членами ряда. Воспользовавшись треугольной аппроксимацией аппаратной функции [4], получим из (2)

$$\delta_2 = \frac{|I - I_0|}{I_0} = \frac{S^2}{12I_0} \left(\left| \frac{\partial^2 I_0}{\partial \hbar\omega^2} + \frac{1}{30} \frac{\partial^4 I_0}{\partial \hbar\omega^4} S^2 \right| \right), \quad (3)$$

где S — полуширина треугольной аппаратной функции (спектральная ширина щели). При использовании (3) для расчета требуемой S по заданной δ_2 необходимо заменить производные от $I_0(\hbar\omega)$ на производные от $I(\hbar\omega)$. Эта замена оправдана, поскольку вносит ошибку более высокого порядка малости по δ_2 . Слагаемое в (3), содержащее $\frac{\partial^4 I}{\partial \hbar\omega^4}$, играет существенную роль лишь в небольших окрестностях тех точек спектра, в которых $\frac{\partial^2 I}{\partial \hbar\omega^2} = 0$. Однако его учет усложняет расчет S из-за необходимости вычисления четвертой производной и решения квадратного уравнения. Для упрощения вычислений мы заменили это слагаемое на $I^{-1} \left(\frac{\partial I}{\partial \hbar\omega} \right)^2$.

Расчеты показали, что такая замена, упрощая вычисление S , не завышает ее величины. В результате можно преобразовать (3) к виду, удобному для вычисления $S(\hbar\omega)$ по заданной δ_2 :

$$S(\hbar\omega) = \left\{ 12I\delta_2 \left[\left| \frac{\partial^2 I}{\partial \hbar\omega^2} + \frac{1}{I} \left(\frac{\partial I}{\partial \hbar\omega} \right)^2 \right| \right]^{-1} \right\}^{1/2}. \quad (4)$$

Как уже отмечалось, при оптимизации процесса регистрации спектра необходимо регулировать не только S , но и h — шаг спектрометра. Величина h , вообще говоря, не влияет на точность измерения сигнала в данной точке спектра. Однако увеличение h может привести к потере некоторой информации о спектре и снижению точности определения параметров спектральных линий. Количественный анализ возникающих при этом погрешностей проведен в работе [5]. Мы в дальнейшем будем полагать $h(\hbar\omega) = S(\hbar\omega)$. Для оценки конкретной величины выигрыша времени (а следовательно, и чувствительности), достигнутого в результате оптимизации регистрации, промоделируем процесс измерения формы спектра. Время измерения T участка спектра от $\hbar\omega_{\min}$ до $\hbar\omega_{\max}$ определяется соотношением

$$T = \int_{\hbar\omega_{\min}}^{\hbar\omega_{\max}} \tau(\hbar\omega) h^{-1}(\hbar\omega) d\hbar\omega, \quad (5)$$

где $\tau(\hbar\omega)$ — время измерения сигнала в точке $\hbar\omega$, зависящее от величины С/Ш в данной точке спектра. С помощью выражения (5) были рассчитаны времена измерения спектра в различных режимах: неоптимизированном с фиксированными $\tau = \tau_0$ и $h = h_0$, $S = S_0$; оптимизированном по времени накопления $\tau = \tau(\hbar\omega)$, $h = h_0$, $S = S_0$; оптимизированном по времени и величине шага $\tau = \tau(\hbar\omega)$, $h = h(\hbar\omega)$, $S = S_0$ и полностью оптимизированном, когда τ , h и S зависят от $\hbar\omega$. Величина $S(\hbar\omega)$ вычислялась из (4); τ_0 есть время, необходимое для достижения заданной величины С/Ш на выходе системы в той точке спектра, в которой это отношение на входе системы минимально. Величины h_0 и S_0 есть минимальные значения h и S , определенные из (4). Связь между τ и величиной сигнала определялась в предположении доминирующего влияния фотонного шума, подчиняющегося пауссоновскому распределению. Величина сигнала находится в квадратичной зависимости от S . На рис. 1 показаны зависимости относительного выигрыша времени при регистрации спектров с частичной и полной оптимизациями по отношению к неоптимизированному процессу регистрации. Вычисления проведены для лоренцевского контура спектральной линии. Из рисунка видно, что величина относительного выигрыша времени η возрастает при увеличении числа оптимизируемых параметров, а также при увеличении диапазона регистрации линии и при диапазоне, равном 10 полуширинам, достигает 60. Реаль-

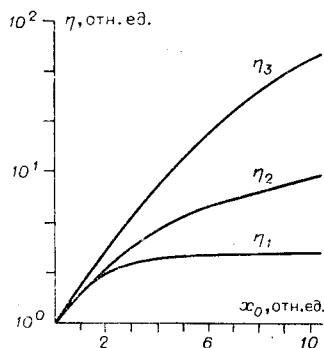


Рис. 1. Зависимости относительного выигрыша времени от протяженности измеряемого спектра $x_0 = \hbar\omega_0/\Gamma$, индексы η указывают число оптимизируемых параметров:
 $\eta_1 \rightarrow \tau = \tau(\hbar\omega), h = h_0, S = S_0;$
 $\eta_2 \rightarrow \tau = \tau(\hbar\omega), h = h(\hbar\omega), S = S_0;$
 $\eta_3 \rightarrow \tau = \tau(\hbar\omega), h = h(\hbar\omega), S = S(\hbar\omega).$

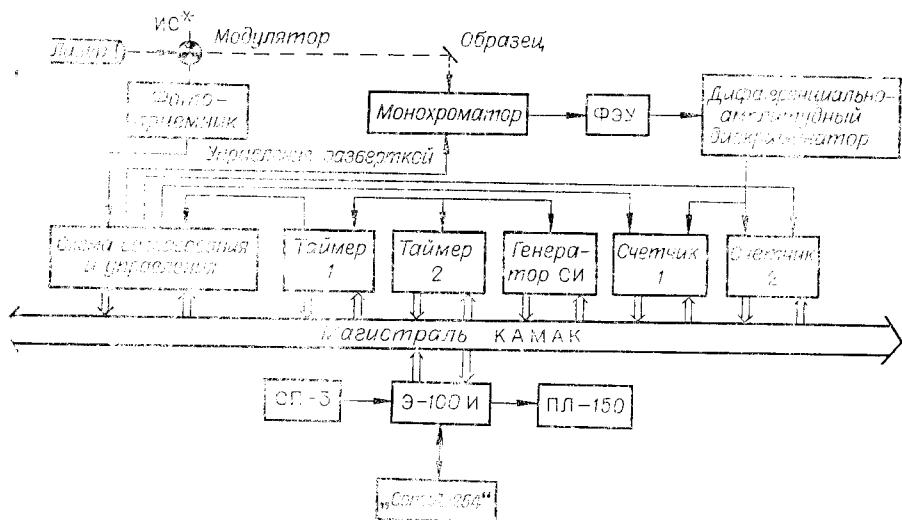


Рис. 2. Структурная схема установки.

ный выигрыш окажется несколько меньше при учете затрат времени управляющей ЭВМ на вычисление необходимых величин.

Ниже описана установка, позволяющая оптимизировать в режиме реального времени процесс измерения спектров комбинационного рассеяния (КР) света, созданная на базе монохроматора ДФС-24, мини-ЭВМ «Электроника-400И», системы счета фотонов и блока сопряжения и управления, реализованных с использованием принципов и конструктивов стандарта КАМАК.

На рис. 2, 3 показаны структурная схема и эпюры напряжений, поясняющие принцип работы установки. На рис. 4 представлен алгоритм управления сбором данных и установкой в целом. Исследуемый образец облучается модулированным по интенсивности пучком лазера. Выделенная монохроматором компонента рассеянного света падает на фотодиодный умножитель. Нами использовался ФЭУ-79, охлаждаемый паром жидкого азота. При открытом модуляторе с выхода амплитудного дискриминатора в систему регистрации поступают стандартизованные импульсы, частота которых пропорциональна интенсивности рассеянного света. Наряду с полезными на вход регистрирующей системы поступают

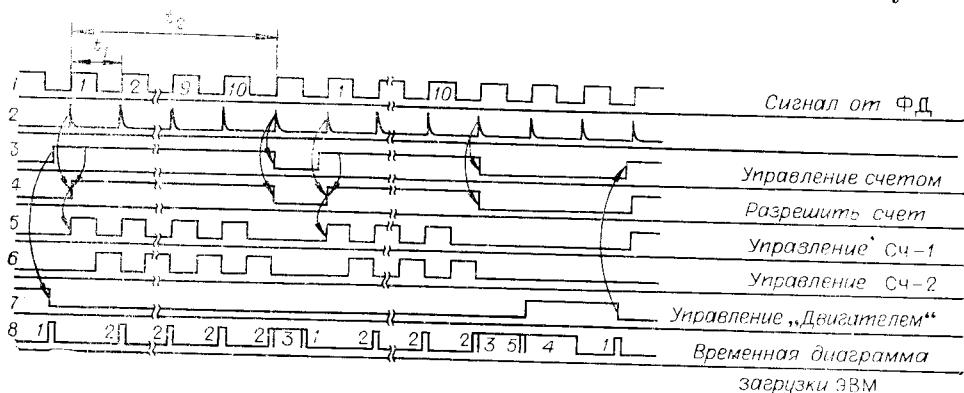


Рис. 3. Временные диаграммы напряжений:

t_1 — микроцикл, t_2 — цикл, 1 — вырабатывается команда «Начать счет», 2 — записывается содержимое счетчиков в память, 3 — рассчитывается достигнутая точность, 4 — обрабатывается накопленная информация и выводится на «Consul-254», 5 — вырабатывается команда «Включить двигатель».

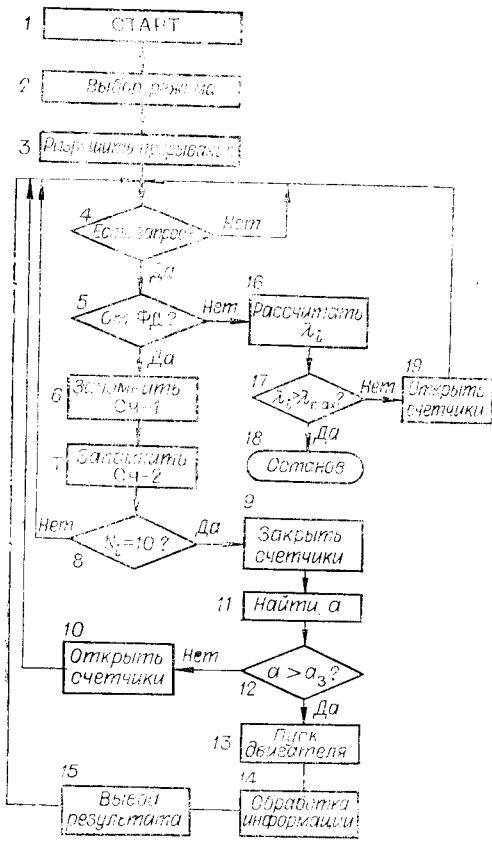


Рис. 4. Алгоритм управления спектрометром.

чик 2 — III) команда «Разрешить счет» (см. рис. 3, график 3) вается при наличии двух условий:

- команды «Управление счетом» (см. рис. 3, график 3);
- импульса начала цикла (см. рис. 3, график 4).

При открытом модуляторе, когда измеряется (С + III), открыт счетчик 1 (см. рис. 3, график 5), при закрытом модуляторе, когда измеряется только шум, — счетчик 2 (см. рис. 3, график 6). После каждого микроцикла t_1 в ЭВМ поступает сигнал прерывания (см. рис. 3, график 8). Определив характер прерывания (см. рис. 4, блок 5), ЭВМ запоминает содержимое счетчиков и разность (С + III) — III.

Сбор информации происходит циклами, состоящими из 10 микроциклов (количество микроциклов в цикле можно менять программно). По окончании цикла (см. рис. 4, блок 8) закрываются счетчики (см. рис. 4, блок 9 и рис. 3, графики 3, 4) и ЭВМ вычисляет текущее среднее значение, дисперсию и точность измерения. Если требуемая точность не достигнута, то вырабатывается команда «Открыть счетчики» (см. рис. 4, блок 10) и происходит еще один цикл сбора данных. Если же требуемая точность достигнута, то вырабатывается команда «Пуск двигателя», проходит необходимая обработка информации и вывод результатов на устройство отображения (см. рис. 4, блок 15 и рис. 3, график 8). После выбора нового значения λ весь процесс повторяется. Если после M циклов сбора данных на некоторой λ_i не будет получена требуемая точность, то ЭВМ переводит монохроматор в λ_{i+1} , выдав при этом на устройство отображения значение достигнутой точности. Максимальное время интегрирования (число M) можно менять программно.

и темновые импульсы, обусловленные термоэмиссией с фотокатода, автоэлектронной эмиссией и радиационным фоном. Таким образом, мы регистрируем сигнал + шум (С + III). При закрытом модуляторе регистрируются темновые импульсы — шум (III).

Процесс измерения спектра осуществляется следующим образом. После отработки двигателем очередной команды выбора нового значения длины волны λ_i (или после команды оператора в начале записи спектра) в ЭВМ поступает сигнал прерывания (см. рис. 3, графики 7, 8). Определив характер прерывания (см. рис. 4, блок 5), ЭВМ рассчитывает новое значение λ_i (устанавливает $\lambda_i = \lambda_{\min}$ в начале эксперимента) и проверяет, находится ли λ_i в заданном оператором диапазоне длин волн $\lambda_{\min} - \lambda_{\max}$. Если $\lambda_i > \lambda_{\max}$, т. е. весь диапазон пройден, то происходит остановка машины (см. рис. 4, блок 18). Если же $\lambda_i < \lambda_{\max}$, то вырабатывается команда «Управление счетом» (см. рис. 4, блок 19 и рис. 3, график 3).

Для синхронизации работы модулятора и счетчиков (счетчик 1 измеряет (С + III), а счетчик

Описанная установка была использована нами для исследования малоизученных слабых линий КР в HgI_2 . На рис. 5 приведен участок спектра КР HgI_2 , возбужденного Не-Не-лазером. Требуемая точность в данном эксперименте составляла 10%. Верхняя кривая получена с помощью автоматизированной установки. Время накопления информации в области слабых линий КР 49, 54, 64 см^{-1} составляло $\tau = 35-40$ с, вблизи максимума сильной линии 112 см^{-1} — $\tau = 4$ с. Нижняя кривая записана в ручном режиме с постоянной времени 10 с (максимальная постоянная времени счетчика фотонов). Этого времени интегрирования, как видно из рисунка, недостаточно для надежного обнаружения слабых линий КР. В области максимума линии 112 см^{-1} время интегрирования избыточно.

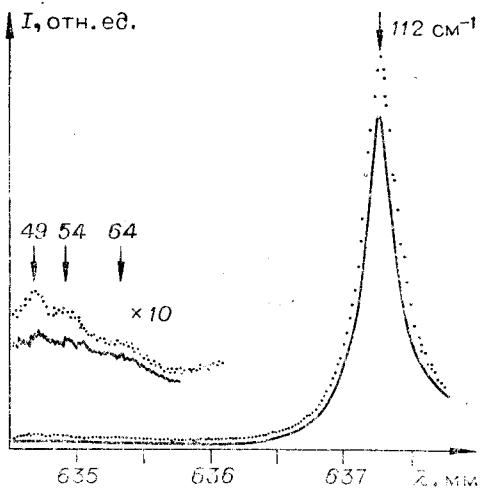


Рис. 5. Участок спектра КР HgI_2 .

ЛИТЕРАТУРА

- Лифляндчик Б. И., Сергеев Д. В., Трилесник И. И. Современное состояние и перспективы использования вычислительной техники в оптическом спектральном приборостроении.—ОМП, 1978, № 5, с. 62—68.
- Yokota T., Takagi Y., Shigenari T. Digital Control of a Raman Spectrometer by a Small Computer and its Application to Soft Mode Spectroscopy.—Jap. J. of Appl. Phys., 1978, vol. 17, N 9, p. 1643—1650.
- Niemczyk T. M., Ettinger D. G. A Computer-Controlled Photon Counting Spectrometer for Rapidly Scanning Low Light Level Spectra.—Appl. Spectrosc., 1978, vol. 32, N 5, p. 450—453.
- Зайдель А. И., Островская Г. В., Островский Ю. И. Техника и практика спектроскопии. М., Наука, 1976.
- Баранова И. Д., Лагутин В. И. Погрешности регистрации спектров, вызванные дискретностью съема информации в спектрофотометрах.—ОМП, 1978, № 5, с. 75—76.

Поступила в редакцию 17 октября 1979 г.

УДК 621.372.54 : 681.327.8

В. К. БЕРЕСНЕВ, Ю. М. КАТРУК, Б. М. РОГАЧЕВСКИЙ,
Ю. И. ЩЕТИНИН, С. П. ЮНОШЕВ
(Новосибирск)

МИКРОПРОЦЕССОРНАЯ СИСТЕМА ОПЕРАТИВНОЙ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ГЕОФИЗИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В геофизических исследованиях широко применяются метод переходных процессов и метод зондирования становлением поля в ближней зоне [1, 2]. В этих методах для получения информации о геоэлектроразрезе измеряются мгновенные значения ЭДС, наведенной в приемной пет-