

В. В. Манойлов, Л. В. Новиков, С. И. Сирвидас
(Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург)

АДАПТИВНАЯ ОЦЕНКА ИОННОГО ТОКА В МАСС-СПЕКТРОМЕТРЕ В ДИНАМИЧЕСКОМ ДИАПАЗОНЕ ($1-10^9$) КОМБИНИРОВАННЫМ ЭЛЕКТРОМЕТРИЧЕСКИМ СЧЕТНЫМ МЕТОДОМ

The method of ion current estimation in the dynamic Range ($1 - 10^9$) is discussed. It's used counter's and electrometric module combined. The results of mathematics simulation are shown.

Введение

Умение измерить и желанным образом истолковать параметры плотности потока частиц в огромном диапазоне измерений — от 1 до 10^8 с^{-1} — является актуальным в аналитическом приборостроении. Действительно, если нам сопутствует успех при решении данной задачи, перед нами открываются широкие перспективы значительного повышения надежности, устойчивости и разрешающей способности прибора чисто формальными (программными) или, как еще говорят, интеллектуальными средствами.

Техническая сторона вопроса, рассматриваемая в работах [1—3], дает основание считать, что более или менее универсальным подходом в деле организации измерений в широком динамическом диапазоне является применение двух методов: аналогового или счетного, и их комбинации [1]. Следует отметить, что во всех трех вариантах в качестве неизбежного элемента используется вторичный электронный умножитель (ЭУ), который преобразует поток частиц (ионов, фотонов) в последовательность импульсов тока, пропорциональную плотности потока частиц [4]. При аналоговом методе измерения плотности потока используются интегральные характеристики импульсов ЭУ и их статистические свойства (распределение амплитуд и ширины). При этом пределом оценки неискаженной плотности потока можно считать величину, обратно пропорциональную средней ширине импульса ЭУ. Интегральные характеристики (постоянные времени порядка $10^{-2} - 10^{-1} \text{ с}$) обуславливают, в конечном итоге, значительную инерционность аналогового метода, что иногда приводит к увеличению погрешности в оценке плотности потока. С другой стороны, этот метод дает надежную оценку плотностей потока порядка сотен мегагерц, так как средняя ширина импульса ЭУ обычно не превышает десятка наносекунд.

Счетный метод измерения плотности потока обычно имеет лучшие точностные показатели для оценки малых плотностей потоков, но при ее увеличении здесь появляются искажения за счет мертвого времени [1], а при плотностях, обратно пропорциональных наибольшей постоянной времени счетного метода, оценка плотности становится принципиально невозможной. Обычно эта величина имеет порядок нескольких единиц или десятков мегагерц [5] при мертвом времени порядка десятков наносекунд.

Комбинированный метод предполагает параллельное подключение к ЭУ аналогового и счетного каналов, чтобы открыть перспективу использования преимуществ, которыми обладает каждый из них. Здесь мы сталкиваемся с некоторыми трудностями подбора параметров элементов в эквивалентных схемах обоих каналов, но тем не менее в определенных случаях игра, наверное,

стоит свеч, особенно если учесть возможность получения комплексных, "интеллектуальных" оценок плотности потока во всем диапазоне ее изменения.

В данной работе на основе математического моделирования сделана попытка теоретически оценить дисперсии оценок плотности потока импульсов в аналоговом, счетном и комбинированном каналах.

1. Исходные предпосылки

Будем считать, что исходный поток частиц имеет постоянную плотность и распределен по закону Пуассона. Ввиду того, что ширина импульса значительно меньше постоянных времени счетного и аналогового каналов, ток ЭУ уместно считать суперпозицией дельтаобразных пиков:

$$i(t) = \sum_{j=1}^N Q_j \delta(t - t_j).$$

Здесь Q_j , t_j — независимые случайные числа с заданными плотностями распределения вероятностей: $Q_j = A_j t_j$ — произведение амплитуды импульса на ширину импульса; N — пуассоновски распределенное число событий с математическим ожиданием $E\{N\} = \lambda t$, где λ — плотность актов первичного излучения, $0 \leq t_j \leq t$ $j = 1 \dots N$.

На основе данных исходных предпосылок в научно-исследовательской работе ИАП РАН были получены оценки дисперсий плотности потока импульсов в аналоговом, счетном и комбинированном каналах [6].

2. Аналоговый метод (канал) измерения

Электрическая схема аналогового канала [3] определяет связь между током ЭУ $i(t)$ и выходным напряжением $U_a(t)$

$$U_a(t) = \int_0^t H_a(t - \tau) i(\tau) d\tau + \eta_a(t),$$

где $H_a(t)$ — импульсная передаточная функция, $\eta_a(t)$ — аппаратный шум.

Мы полагаем, что $\eta_a(t)$ — стационарный случайный процесс с нулевым средним. В свою очередь

$$H_a(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} H_a^{(L)}(P) \exp\{P t\} dP.$$

Здесь $H_a^{(L)}(P)$ — лапласов образ $H_a(t)$. С учетом параметров электрической схемы аналогового канала, а также независимости случайных величин Q_j , t_j и того факта, что при $t \rightarrow \infty$ $E\{N\} = \lambda t \rightarrow \infty$, получаем дисперсию оценки плотности потока в аналоговом канале

$$E\{(\lambda - \hat{\lambda}_a)^2\} = \frac{G_a^2 (K + 1)}{R^2 K^2 E^2 \{Q_j\}},$$

или

$$\Delta_a = E^{1/2} \{(\lambda - \hat{\lambda}_a)^2\} = \frac{G\eta_a(K+1)}{R_1 K E \{Q_j\}},$$

где $\hat{\lambda}_a$ — несмещенная оценка математического ожидания плотности измеряемого потока, $G\eta_a$ — мощность шума η_a , K — коэффициент усиления операционного усилителя, R_1 — сопротивление обратной связи операционного усилителя.

3. Счетный канал

Аналогично предыдущему, в соответствии с электрической схемой счетного канала, имеем

$$U_c(t) = \int_0^t H_c(t-\tau) i(\tau) d\tau + \eta_c(t),$$

где $\eta_c(t)$ — стационарный шум с нулевым средним и конечной дисперсией. Будем считать, что при $t \rightarrow \infty$ содержимое счетчика $G(t) \rightarrow E\{N\} \rightarrow N P_0$, где P_0 — вероятность события.

Согласно [5] получаем несмещенную оценку плотности потока

$$\hat{\lambda}_c = \frac{G(t) / P_0 t}{1 + (\tau_0 / P_0 t) G(t)},$$

где τ_0 — мертвое время счетчика.

Среднеквадратичная ошибка оценки рассчитывается по уравнению

$$\Delta_c = \sqrt{E((\lambda - \hat{\lambda}_c)^2)} = \frac{1}{\sqrt{\lambda t}} \frac{(1 + G^2 \lambda^2)^{1/2}}{(1 + \lambda^2 \tau_0^2)^{3/2}}, \quad (1)$$

где G^2 — дисперсия метрового времени счетчика.

4. Комбинированный канал

Эквивалентная электрическая схема комбинированного (аналогово-счетного) измерительного канала представлена на рис. 1. Соответствующие ошибки обеих оценок получаем, пользуясь указанным выше подходом

$$\Delta_a = E \{(\lambda - \hat{\lambda}_a)^2\} = \frac{G\eta_a}{J_a E \{Q_j\}}, \quad (2)$$

где $G\eta_a$ — мощность шума напряжения на выходе аналогового звена;

$$J_a = \frac{K R_1 (\tau_\Sigma - \tau_{22})}{(K+1) \tau_\Sigma}.$$

Здесь $\tau_\Sigma = R_1 C_{0c} + R_2 C_2 + R_3 C_0 + R_1 C_0 + R_1 C_2$; $\tau_{22} = R_2 C_2$. Как видно из формулы (2), на ошибку оценки измерений в аналоговом звене оказывают

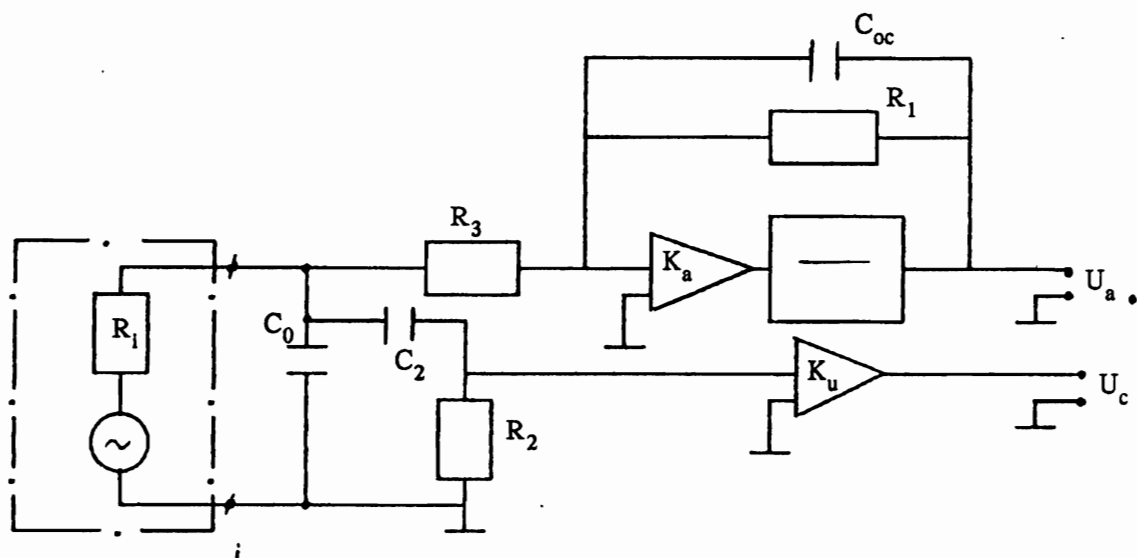


Рис. 1. Электрическая схема комбинированного канала.

R_i - внутреннее сопротивление источника сигнала, C_{oc} - паразитная емкость в цепи обратной связи, C_0 , C_2 - емкостные параметры эквивалентной схемы, R_1 , R_2 , R_3 - резистивные параметры эквивалентной схемы, K_a - операционный усилитель аналогового звена, K_u - импульсный усилитель счетного звена, U_a - выходной сигнал аналогового звена, U_c - выходной сигнал счетного звена.

влияние параметры схемы, связанные с объединением двух каналов в один. Ошибка оценки измерений в счетном звене остается такой же, как и в автономном случае, и соответствует формуле (1).

5. Статистические характеристики импульсов тока ЭУ

Как следует из вышеизложенного, для расчета оценок плотности потока частиц в обоих каналах нужно обладать сведениями о статистических свойствах импульсов ЭУ. Такие сведения можно найти, например, в [4], где утверждается, что плотность вероятности распределения заряда в импульсе ЭУ в зависимости от его (ЭУ) структуры может быть задана двумя свойствами унимодальных функций (рассмотрение мультимодальных вариантов мы считаем излишним на данном этапе исследований):

— экспоненциальная

$$f_s(Q) = \begin{cases} \frac{1}{Q} \exp\left\{-\frac{Q}{\bar{Q}}\right\} & Q \geq 0 \\ 0 & Q < 0 \end{cases},$$

— нормальная

$$f_n(Q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha Q}} \exp\left\{-\frac{(Q - \bar{Q})^2}{2\alpha^2 \bar{Q}^2}\right\}$$

$$1 < \alpha < 1,5.$$

Очевидно, что здесь $Q = A\mu$. Отсюда для обоих видов распределений можно найти первый и второй моменты, необходимые для оценки плотности потока в диалоговом и счетном звеньях

$$E\{Q\} = \left\{ \begin{array}{l} \bar{Q}_3 \\ \bar{Q}_n \alpha \end{array} \right.,$$

$$\sqrt{E\{Q - \bar{Q}^2\}} = \left\{ \begin{array}{l} \bar{Q}_3 \\ \alpha \bar{Q}_n \end{array} \right.,$$

для реальной ЭУ

$$\bar{Q} = \left\{ \begin{array}{l} (\sim 10^{-14} \text{ Кл})_3 \\ (\sim 10^{-13} \text{ Кл})_n \end{array} \right. .$$

6. Стратегия вычисления оценки плотности потока частиц в комбинированном измерительном канале

Как следует из вышесказанного, основная идея комбинированного метода заключается в том, чтобы расширить динамический диапазон выработки оценок плотности потока и повысить точность этих оценок путем комплексной их обработки в той области, где измерения аналогового и счетного звеньев заслуживают доверия. Предполагаемая программа комплексной обработки в комбинированном канале, по нашему мнению, должна включать несколько алгоритмов:

- алгоритм съема аналоговых данных с аналого-цифрового преобразователя, работающего с тактом Δ_t (мкс), и синхронизации этих данных со счетным звеном;
- алгоритм анализа дискретных данных обоих звеньев с целью исключения выбросов, предварительного сглаживания и оценки мощности шума;
- алгоритм комплексной оценки плотности потока исходя из имеющейся априорной информации о сигналах;
- алгоритм управления амплитудными программами в обоих звеньях с целью достижения наилучших условий измерения плотности потока, а также алгоритм управления диапазонами измерений.

Первый алгоритм в этом перечне является стандартным, а о последнем, связанном с конкретным вариантом реализации комбинированного канала, можно будет говорить в будущем. Поэтому обсуждению подлежат два оставшихся алгоритма универсального характера.

1. Алгоритм анализа данных, который базируется на методе минимизации квадрата медианного остатка и методе наименьших квадратов для получения наименьшей невязки в движущемся окне данных. Так, если обозначить двумерным вектором $z(n)$ синхронизированные данные обоих звеньев, то алгоритм реализует программу

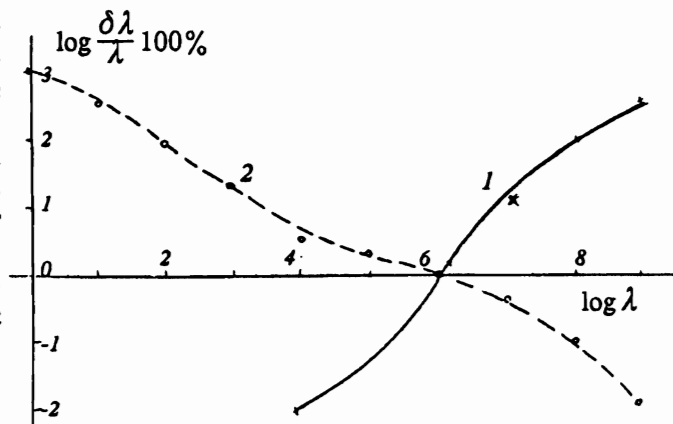
$$\sum_{j=-L}^{+L} (z(n+j) - a(n) - b(n)j - c(n)j^2)^2 \quad P(j) \rightarrow \min_{a, b, c},$$

в которой весовая функция $P(j)$ устанавливается по принципу

$$\min \rightarrow \text{med } (z(n+j) - a(n) - b(n)j - c(n)j^2)_{a, b, c}.$$

В результате работы программы анализа данных мы получаем сглаженные данные наименьшей невязки.

2. Алгоритм, нацеленный на исключение базовой линии в аналоговом канале, расчет плотности потока частиц в счетном канале с учетом компенсации просчетов в соответствии с формулой (1), и расчет комплексной оценки плотности потока.



7. Заключение

Основное назначение использования комбинированного измерительного канала заключается в существенном расширении динамического диапазона, который, например, для химических и изотопных масс-спектрометров равен $\sim 10^9$ (т. е. есть задачи, в которых эффективное функционирование прибора сопряжено с измерением ионных токов от 10^{-19} А до 10^{-10} А). Естественно, перекрытие такого диапазона только счетным звеном мало реально, так как счетное звено обладает постоянной времени порядка 10^{-7} с, а регистрация токов $\sim 10^{-10}$ А требует постоянной времени $\sim 10^{-9}$ с, что на порядок меньше, чем мертвое время счетчика. На рис. 2 представлены графики логарифмов ошибок комплексной обработки от логарифма λ для получения оценок в соответствии с алгоритмом 2. Отсюда видно, что счетный канал удовлетворительно работает до тех пор, пока скорость потока частиц меньше, чем 10^6 имп/с, аналоговый — более, чем 10^6 имп/с.

Рис. 2. Зависимость логарифма относительной погрешности измерения плотности потока в аналоговом (кривая 1) и в счетном (кривая 2) каналах от логарифма плотности потока.

ЛИТЕРАТУРА

1. Разников В. В., Разникова М. О. Информационно-аналитическая масс-спектрометрия, М., 1992.
2. Ланин Е. В., Масленников А. И. Автоматизация масс-спектрометрического эксперимента. Уфа, 1986.
3. А. С. 14577167 (СССР).
4. Айнбунд М., Поленов Б. Вторичные электронные умножители открытого типа и их применение. М., 1981.
5. Ватулин В., Телевикова Т., Чистякова В. Вероятностные методы в физических исследованиях. М., 1985.
6. Информационно-обрабатывающие, измерительные и управляющие каналы на базе специализированных полузаказных и гибридных БИС: Отчет о НИР ИАП РАН. СПб., 1993.