

6614

ЭКЗ. ЧИТ. ЗАЛА

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна.

10 - 6614



ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ

Э.Рупп

ПРОГРАММА НА ФОРТРАНЕ ДЛЯ ОБРАБОТКИ  
ГАММА- И БЕТА-СПЕКТРОВ

1972

10 - 6614

Э.Рупп

ПРОГРАММА НА ФОРТРАНЕ ДЛЯ ОБРАБОТКИ  
ГАММА- И БЕТА-СПЕКТРОВ

## В в е д е н и е

В настоящее время имеется прямая связь между машинами "Минск-2" и "БЭСМ-6"<sup>/3/</sup>. Экспериментальные данные и результаты предварительной обработки гамма- и бета-спектров, хранящиеся на магнитной ленте "Минск-2", могут быть переданы на магнитные ленты "БЭСМ-6" для полной обработки.

В данной работе предлагается программа, написанная на ФОРТРАНЕ, для полной обработки спектров по методу наименьших квадратов. Программа написана на основе работы /1/, в которой исследовалось описание формы линии у гамма-спектров и спектров конверсионных электронов с помощью разных моделей.

Программа записана на магнитной ленте "БЭСМ-6".

### Метод обработки

Метод наименьших квадратов состоит в нахождении минимума функционала:

$$M = \sum_{j=1}^n \omega_j (F_j - f_j(c_1, \dots, c_r, N_j))^2, \quad (I)$$

где  $n$  - число экспериментальных точек;

$r$  - число параметров;

$\omega_j$  - статистический вес;

$F_j$  - экспериментальное значение в  $N_j$ -той точке, которое можно описать с помощью функции  $f_j$ ;

$c_i$  -  $i$ -ый параметр.

Подробнее о поиске минимума этого функционала см. /2/.

При обработке спектрометрической информации мы имеем экспериментальные данные, а именно: количество импульсов  $F_j$  в  $N_j$  канале, где  $0 < j \leq n$ . Задачей является определение характеристик пиков спектра: полуширины, позиции, площади, коэффициента асимметрии и параметров фона. Данные  $F_j$  аппроксимируются значениями функции  $f_j$ , которая выражается двумя функциями симметричного и одной функцией асимметричного типа. Симметричная функция Гаусса выглядит следующим образом:

$$f_j = \frac{P}{d\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^m S_k \exp \left\{ -\left[ \frac{P}{d} (N_j - N_k) \right]^2 \right\} + \sum_{\ell=1}^s a_\ell (N_j - A)^{\ell-1} \quad (2)$$

Вторая симметричная функция - это функция (2) с учетом интегрирования по каналам

$$f_j = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^m S_k \int_{P/d(N_j - N_k - 0,5)}^{P/d(N_j - N_k + 0,5)} e^{-y^2} dy + \sum_{\ell=1}^s \frac{a_\ell}{\ell} \left[ (N_j + 0,5 - A)^\ell - (N_j - 0,5 + A)^\ell \right] \quad (3)$$

и асимметричная функция - это:

$$f_j = 4 \sum_{k=1}^m F_k \left\{ \exp \left[ -\frac{N_j - N_k}{\sigma(1+d)} \right] + \exp \left[ \frac{N_j - N_k}{\sigma(1-d)} \right] \right\}^{-2} + \sum_{\ell=1}^s a_\ell (N_j - A)^{\ell-1} \quad (4)$$

где  $P = 2 (\ln 2)^{1/2}$ ;

$d$  - полуширина,  $\sigma = \frac{d}{1,76}$ ;

$A$  - начальный номер канала в участке;

$m$  - количество пиков в участке;

$s$  - степень полинома, описывающего фон;

$N_k$  - положение максимума в каналах (позиция);

$F_k$  - значение функции в точке  $N_k$ ;

$S_k$  - площадь пика;

$a_\ell$  - коэффициент фона;

$\alpha$  - коэффициент асимметрии;

$$0 < k \leq m ; \quad 0 < \ell \leq s$$

При обработке с использованием функции (2) и (3) определяемыми параметрами являются:

$$d, N_1, S_1, N_2, S_2, \dots, N_m, S_m, a_1, \dots, a_s; \quad (5)$$

а с функцией (4)

$$d, N_1, F_1, N_2, F_2, \dots, N_m, F_m, a_1, \dots, a_s, \alpha, \quad (6)$$

когда площадь пика вычисляется по формуле:

$$S_k = 2 \sigma F_k (1 - \alpha^2) \frac{\pi \alpha}{\sin \pi \alpha}.$$

Производные по параметрам для функции (2), (3), (4) подробно описаны в работе /I/.

#### Программа

Программа имеет три варианта, они написаны на ФОРТРАНе и задействованы на ЭВМ "БЭСМ-6". Гамма-спектры можно обрабатывать с помощью симметричных функций (2) и (3). Обработка спектров конверсионных электронов ведется асимметричной функцией (4). Исходным материалом для программы является выдача, после предварительной обработки, экспериментальных данных на "Минск-2". С помощью светового карандаша отмечаются начальные значения параметров для набора (5) или (6), которые записываются на магнитную ленту "Минск-2". При работе на "БЭСМ-6" используется программа И.Н.Силина FUMILI по методу наименьших квадратов.

Добавление к обработке по программе, написанной в /I/, следующее. Полуширина и коэффициент асимметрии определяются или задаются на первом этапе, а затем определяются только остальные параметры. Вначале рассматривается весь спектр на экране осциллографа "Минск-2", чтобы найти хорошие одиночные пики. По этим пикам на "БЭСМ-6" вычисляются полуширина и коэффициент асимметрии, для других пиков их значения берутся по интерполяции. При разложении сложных пиков

пользуемся таким режимом FUMILI, когда заранее заданы верхние и нижние границы для каждого параметра, в этом случае сходимость метода улучшается.

Спектр обрабатывается по участкам, длина участка ограничивается из-за обработки со световым карандашом и по требованию FUMILI. Длина участка может быть не больше 500 в каналах и число всех параметров не больше 100.

Программы называются СРЕКТ1, СРЕКТ2 и СРЕКТ3.

В программы входят подпрограммы:

```
SUBROUTINE ASYMM (функция (4) )
SUBROUTINE SYMM1 (функция (2) )
SUBROUTINE SYMM2 (функция (3) )
```

и общие подпрограммы:

```
SUBROUTINE ERROR(K)
SUBROUTINE ARITHM(Y)
SUBROUTINE ERPOL(K)
```

Сама программа состоит из следующих блоков:

```
TO WORK WITH ASYMMETRICAL FUNCTION
или TO WORK WITH SYMMETRICAL FUNCTION
NOT ANY SINGLE PEAKS
ONE, TWO OR THREE SINGLE PEAKS.
```

В программе сначала рассматриваются одиночные пики. Если есть один, хорошо видный одиночный пик, то он обычным порядком обрабатывается по ASYMM, SYMM1 или SYMM2. Получаемые значения параметров полуширины и коэффициент асимметрии для других участков спектра берутся как константы. Точнее сказать, при дальнейшей обработке эти параметры зафиксированы. По желанию можно

их и не фиксировать. В случае, если в спектре есть два или три хороших одиночных пика, сначала обрабатываются они, потом в каждом участке для его середины определяется полуширина и коэффициент асимметрии с ошибками методом интерполяции. При дальнейшей обработке эти параметры в данном участке фиксируются. Существует еще такой режим работы, когда заранее можно задавать значение полуширины. В случае, если одиночных пиков нет, по подпрограмме ASYMM, SYMM1 или SYMM2, обрабатываются подряд все участки спектра.

Заметим, что после обработки двадцати участков выдается собранная печать.

В подпрограммах ASYMM, SYMM1 и SYMM2 производится подготовка экспериментальных данных и параметров для работы по МНК. Они содержат следующие блоки:

GENERAL PART  
INITIAL VALUE FOR WIDTH  
PARAMETERS PUT TOGETHER  
SPECIAL PART FOR SYMMETRICAL FUNCTION  
или SPECIAL PART FOR ASYMMETRICAL FUNCTION  
BOUNDARY CONDITION  
PRINTING INPUT VALUES  
PREPARING FOR FUMILI  
PEAK AREAS AND ERRORS.

В случае асимметрии площади пиков и их ошибки вычисляются отдельно. Интервалы для параметров задаются довольно грубо, для позиции нижняя граница - это позиция предыдущего пика (или начало участка), верхняя граница - позиция следующего пика (или ко-

нец участка). Для площадей пиков нижняя граница 0, верхняя граница в 10 раз больше, чем сама площадь. Для полуширины:

$$0 < d < 3d$$

и для коэффициента асимметрии

$$0 < \alpha < 10.$$

Для параметра фона  $a_e$ , эти границы:

$$a_e - |3a_e| < a_e < a_e + |3a_e|.$$

Обращение к подпрограмме *ERRDR* (K) возможно при различных практических ошибках и числом материале (допустим, что подсчитанное количество экспериментальных точек больше, чем длина участка в каналах, или порядок фона получился отрицательным и т.д.).

*SUBROUTINE ARITHM* (Y) необходима для работы с *FUMILI* и содержит конкретную арифметику для функции (2), (3) и (4). Она вычисляет значения функции  $f_j$  в каждом канале  $N_j$  и производные по всем параметрам. По подпрограмме *ERPDL* (K) производится интерполяция.

Обработанные примеры показали, что сложные пики, которые не разделялись по программе в работе /1/, по данной программе хорошо обрабатываются. Время счета сильно зависит от сложности участка. Примерно 20 простых участков были обработаны на "БЭСМ-6" за 1 минуту 34 секунды, а обработка только одного очень сложного участка из 98 каналов и 12 пиков по функции (4) потребовала 3,5 минут.

Настоящее сообщение следует рассматривать как предварительное, поскольку массовая эксплуатация только начинается и к программе будет подключена калибровка по энергии.



## Инструкция

Данные размеченных участков, лежащие на магнитной ленте ЭВМ "Минск-2", формируются по программе М.И.Фоминных в таком виде, как требует "БЭСМ-6". При этом, перед данными находится шапка:

```
* NAME M2
* ASSIGN LIBRARY 1
* ASSIGN TAPE
* PERSONAL LIBRARY
* MAIN SPEKT 1
* EXECUTE.
```

Здесь командой \* MAIN SPEKT сообщается, по какой программе следует вести обработку. Затем необходимо передать для работы программы SPEKT 1, SPEKT 2 или SPEKT 3 значения целых переменных IDA и IS. В начале данных должны находиться участки с хорошими одиночными пиками - если они вообще есть. Потом с помощью прямой связи <sup>13/</sup> все данные можно передать на "БЭСМ-6".

Пока существуют следующие режимы работы:

IDA = 0	нет одиночного пика
IDA = 0 и IS > 20	нет одиночного пика, но задается для полуширины конкретное значение (оно может меняться от 2 до 8),
IDA = 1	есть один хороший пик.
IDA = 1 и IS = 11	есть один хороший пик, но значение для полуширины и коэффициент асимметрии при дальнейшей обработке не фиксируется,
IDA = 2	есть два одиночных пика,
IDA = 3	есть три одиночных пика.

При любой IDA, если IS = 99, выдается в участках подробная печать.

При значении  $IS$ , не имеющих конкретного значения,  $IS$  должна равняться  $IO$ .

Если  $IDA = 0$ , в случае работы с асимметричной функцией, для коэффициента асимметрии задается как начальная величина  $O.I.$

Выражаю благодарность Л.Почу за ценные дискуссии при составлении программ, И.И.Фоминных и Н.С.Заикину за совместную работу при запуске программы и передаче экспериментальных данных с "Минск-2" на "БЭСМ-6".

#### Литература

1. Э.Рупп. Препринт ОИЯИ, Дубна P10-5776, 1971
2. И.Н.Силин. Стандартная программа D 520,  
Депонированная публикация ОИЯИ Б1-II-5661, 1970.
3. С.Аврамов и др. Препринт ОИЯИ, Дубна IO-6467, 1972.

Рукопись поступила в издательский отдел  
19 июля 1972 г.