

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

4549/2-80

22/9-80

10-80-408

Во Дак Банг, Чан Динь Куок

К ПРИМЕНЕНИЮ КОНВОЛЮЦИОННОГО АНАЛИЗА
ПРИ ОБРАБОТКЕ ИЗОЛИРОВАННОГО ПИКА
В АМПЛИТУДНОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ

1980

Во Дак Банг, Чан Динь Куок

10-80-408

К применению конволюционного анализа при обработке
изолированного пика в амплитудном распределении

Описывается основанная на применении конволюционного
анализа простая методика обработки изолированного пика в ам-
плитудном распределении, позволяющая учитывать кривизну фона,
описываемого полиномом степени до двух включительно. Методи-
ка эффективна при обработке пиков, измеренных с хорошей ста-
тистикой и достаточно большим соотношением пик/фон. При ма-
лой статистике необходимо проведение предварительного тща-
тельного сглаживания спектра.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1980

Vo Dak Bang, Tran Dinh Quoc

10-80-408

On Application of the Convolution Technique
to the Quantitative Analysis of Isolated Peak
in Amplitude Distribution

В настоящее время применяется целый ряд методик для обра-
ботки амплитудных спектров /см., например,^{1/} /. Эти мето-
дики позволяют найти параметры пиков в весьма сложных
спектрах. На практике же зачастую имеют дело с обра-
боткой отдельных хорошо разрешенных изолированных пи-
ков. Такая ситуация имеет место, к примеру, при
активационном анализе, при работе с активационными
фольгами для измерения характеристик нейтронных полей
и т.д. В таких случаях желательно иметь достаточно простой
метод обработки пика с привлечением минимальных вычислительных
средств. Один из такого рода методов, основанный на примене-
нии конволюционного анализа, предложен в работе^{2/}. Однако
в этой работе сравнительно простая процедура вычисления пара-
метров пика получается лишь в предположении о прямолинейности
непрерывной составляющей спектра /фона/, что порой не имеет
места на практике. В данной работе развит иной подход, позво-
ляющий учитывать ее кривизну.

Предположим, что одиночный пик полного поглощения описыва-
ется гауссианом:

$$G(x-M) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp[-(x-M)^2 / 2\sigma^2],$$

где x , M , σ , A - соответственно координаты по оси абсцисс
/номера каналов анализатора/, положение максимума, ширина и
его площадь. Далее, пусть стохастический компонент спектра
равен нулю, а его непрерывная составляющая описывается поли-
номом степени n :

$$\Phi(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k. \quad /1/$$

Таким образом, участок спектра, подлежащий анализу, пред-
ставляется в виде функции

$$F(x) = G(x-M) + \sum_{k=0}^n a_k x^k. \quad /2/$$

Умножая вторую производную функции $F(x)$ на первую производ-
ную от гауссовой функции $G(x-T)$, отнормированной на едини-
цу, и интегрируя в бесконечных пределах, получаем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F''(x) G'(x-T) dx = \frac{A}{2\pi\sigma^3\sigma_c^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[1 - \frac{(x-M)^2}{\sigma^2}\right] \cdot (x-T) \times$$

$$\times \exp\left\{-\left[\frac{(x-M)^2}{2\sigma^2} + \frac{(x-T)^2}{2\sigma_c^2}\right]\right\} dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k=2}^n ka_k x^{k-2} \frac{(x-T)}{\sqrt{2\pi\sigma_c^3}} \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{(x-T)^2}{2\sigma_c^2}\right] dx = I_1(T) - I_2(T), \quad /3/$$

где T, σ_c - положение максимума и ширина гауссиана, выбранного для конволюции исходного спектра. Проинтегрировав и произведя тривиальные преобразования, получаем в итоге из /3/

$$I_1(\theta) = -\frac{A\theta \exp[-\theta^2/2\Delta^2]}{\sqrt{2\pi\sigma^2\Delta^3}} \left[1 + \frac{1}{\Delta^2} (2\sigma^2 - \sigma_c^2 - \frac{\sigma^2\theta^2}{\Delta^2})\right], \quad /4/$$

где $\Delta^2 = \sigma_c^2 + \sigma^2$, $\theta = T - M$,

$$I_2(q) = -p \exp(-q^2/p) \left[\sum_{k=2}^n \frac{ka_k}{2^{k-2}} \left(\frac{d^{k-1} \exp(q^2/p)}{dq^{k-1}} - \right. \right.$$

$$\left. \left. - 2 \frac{q}{p} \frac{d^{k-2} \exp(q^2/p)}{dq^{k-2}} \right) \right],$$

здесь $p = 1/2\sigma_c^2$, $q = T/2\sigma_c^2$.

Нетрудно усмотреть, что при $n=0,1,2$ последний интеграл обращается в нуль:

$$I_2(q) \equiv 0.$$

Таким образом, при наличии фона, описываемого в виде многочлена до второй степени включительно, вся информация об анализируемом пике заключена в функции $I_1(\theta)$. Эта функция, как следует из ее анализа, оказывается нечетной относительно θ , обращается в нуль при $\theta=0$ и $\theta_{1,2} = \pm\sqrt{3\Delta^2}$. Следовательно, найдя из экспериментальных данных $I_1(\theta)$, можно определить интересующие нас параметры пика: его положение, соответствующее

средней нулевой точке, ширину, которую можно вычислить на основе формулы

$$\sigma = \sqrt{\theta_0^2/3 - \sigma_c^2}, \quad /5/$$

здесь $\theta_0 = |\theta_1| = |\theta_2|$, и его площадь:

$$A = \frac{\sqrt{2\pi} \sigma^2 \Delta^3 I_1(\theta)}{\theta \exp(-\theta^2/2\Delta^2) [1 + (1/\Delta^2)(2\sigma^2 - \sigma_c^2 - \sigma^2\theta^2/\Delta^2)]}. \quad /6/$$

На рис.1 приведена рассчитанная по формуле /4/ функция $I_1(T)$ для $A=1$, $\sigma=3$, $\sigma_c=4$, $M=24$.

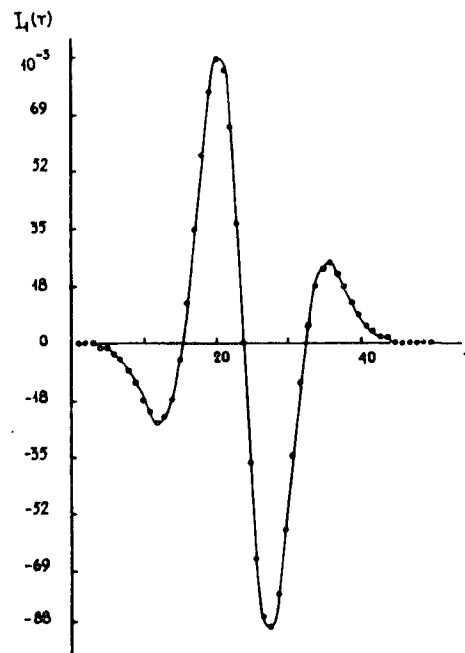


Рис.1. Вид функции $I_1(T)$, расчет по формуле /4/.

В соответствии с вышеизложенным была составлена программа на языке FORTRAN, осуществляющая следующие операции:

1/ n -кратное сглаживание участка спектра, подлежащего обработке,

2/ нахождение его вторых производных,

3/ проведение конволюции первой производной гауссиана, ортонормированного на единицу,

4/ отыскание нулей функции $I_1(T)$,

5/ расчет параметров пика A, σ, M по формулам /5/ и /6/.

Программа была опробована при анализе "идеальных" спектров, представляющих собой математически заданные гауссианы, расположенные на криволинейном фоне. Результаты расчетов показали, что предложенная методика является вполне работоспособной. В дальнейшем она была испытана для обработки пика /411,8 кэВ/ изотопа золота ^{198}Au , получаемого облучением резонансными нейтронами на микротроне МТ-17 Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ. Фон создавался ис-

кусственно, путем варьирования расстояния от образцового источника ^{137}Cs до Ge(Li) -детектора. На рис.2 показан обрабатываемый участок спектра при незначительном прямолинейном фоне (а), а также вид этого же пика, "посаженного" на край комптоновского распределения с большой кривизной /б/. На рис.3

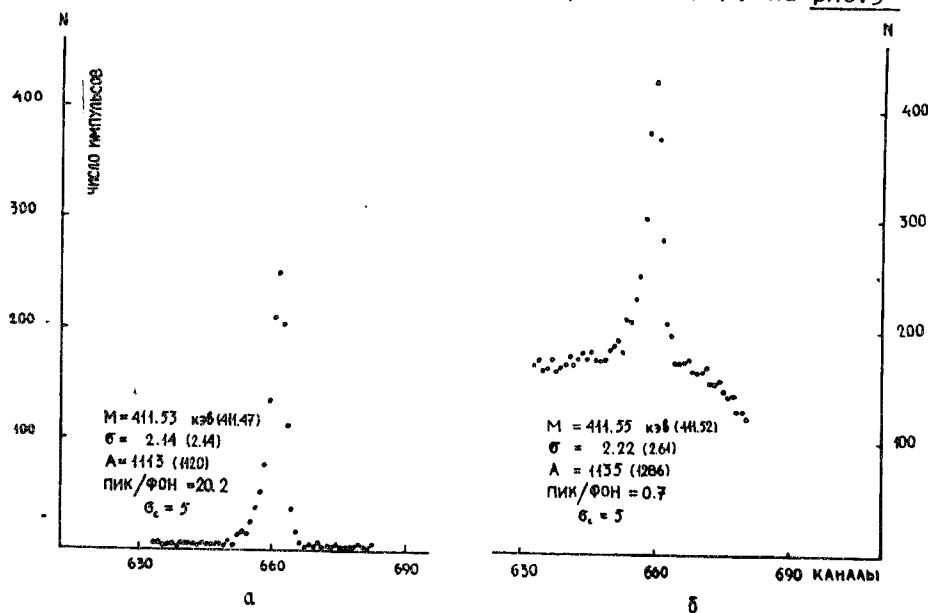


Рис.2. Обрабатываемый участок спектра изотопа золота ^{198}Au : кривая а - пик 411,8 кэВ на прямолинейном фоне, б - тот же пик на краю комптоновского распределения.

изображены рассчитанные по программе функции $I_1(T)$ для этих случаев. Результаты обработки этих двух пиков по изложенной в этой работе методике /цифры без скобок на рис.2/ не претерпели заметных изменений /различие в величине А не превышает 2-3%/, в то время как обсчет пика, изображенного на рис.2б, по методике, предложенной в ^{2/}/цифры в скобках на рис.2/, дал завышенное /на 25% для $\sigma_c = 6$ / значение величины А, что является естественным, т.к. эта методика рассчитана на исключение только прямолинейного фона. Сказанное иллюстрируется также рис.4, на котором представлена зависимость параметра А от σ_c . Видно, что для спектра с прямолинейным фоном /рис.2а/ величина А, рассчитанная как по изложенному здесь методу /кривая 1/, так и по методу ^{2/}/кривая 2/, с ростом σ_c асимпто-

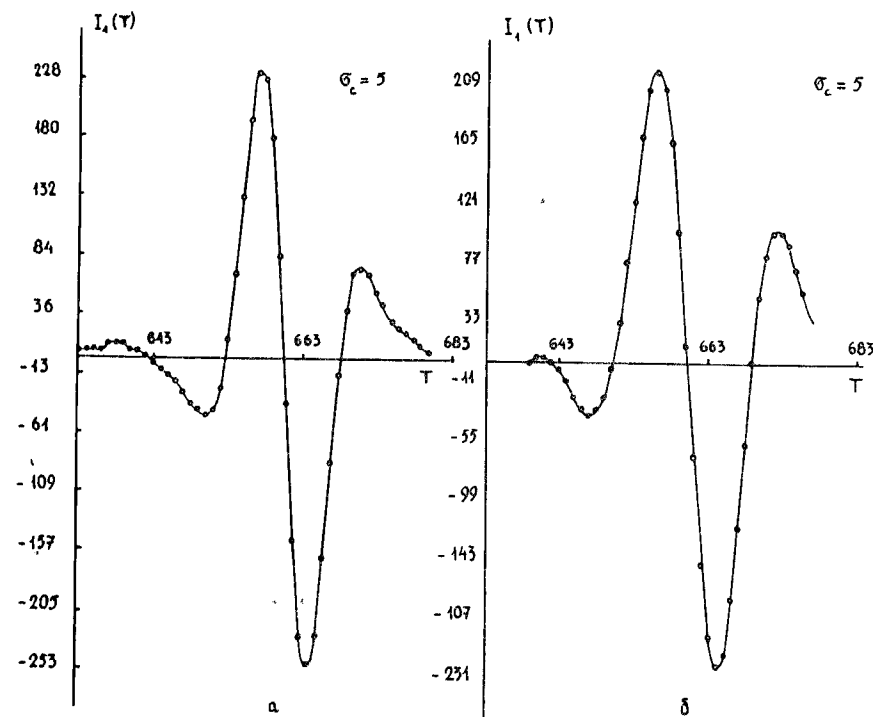


Рис.3. Вид рассчитанных по программе функций $I_1(T)$ для участков спектра а и б, приведенных на рис.2.

тически стремится к пределу, равному своему истинному значению. Обработка же спектра с криволинейным фоном /рис.2б/ привела к сильно различающимся результатам /кривая 3 - расчет по данному методу, кривая 4 - по ^{2/}/. Была предпринята попытка обработать по составленной программе /при $\sigma_c = 5$ / ряд спектров со значительным прямолинейным /рис.5а, в/ и криволинейным /рис.5б, г/ фоном.

Следует отметить, что данная методика оперирует второй производной, которая подвержена сильным флуктуациям, в особенности для спектров, измеренных с плохой статистикой. Практика показывает, что вследствие этого параметр А чувствителен к случайным выбросам в области пика. Поэтому операцию предварительного исправления выпавших точек и сглаживания необходимо проводить по возможности более тщательно. В противном случае метод рекомендуется применять лишь при обработке спектров, измеренных с хорошей статистикой.

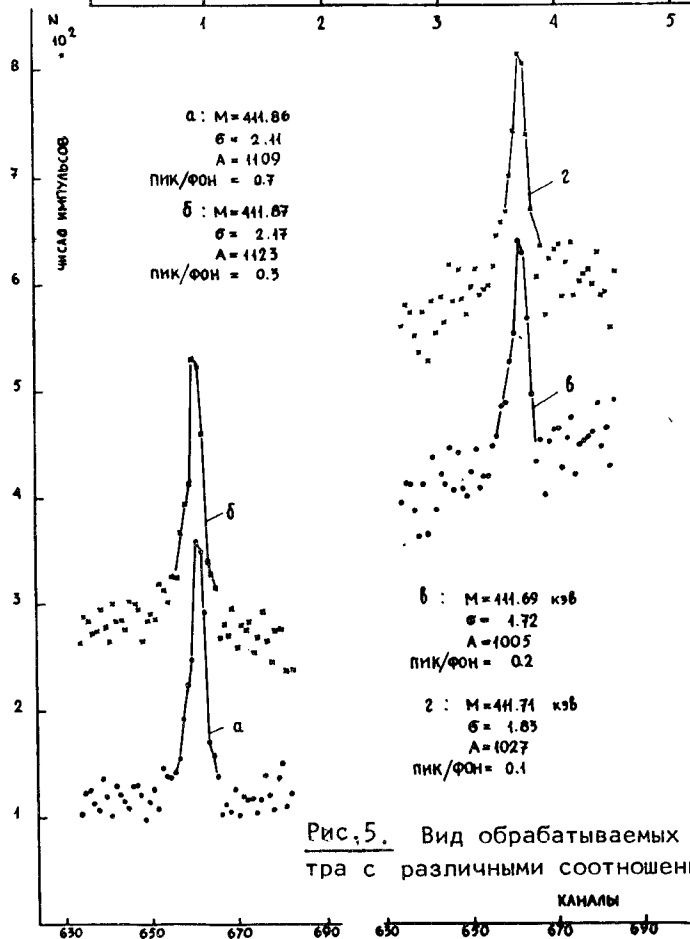
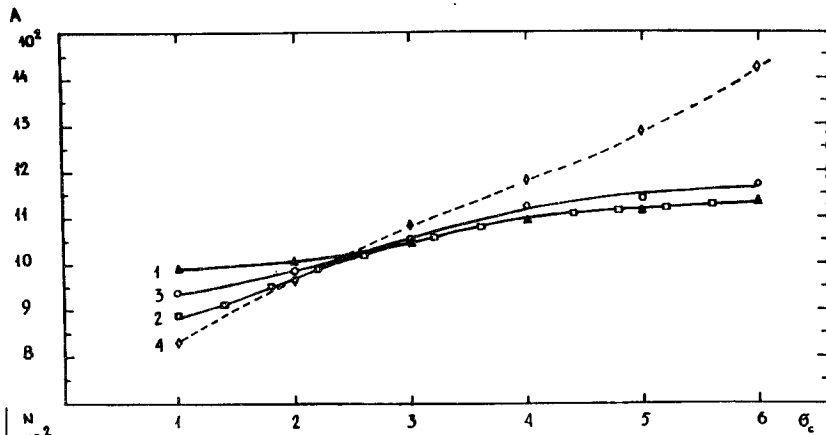


Рис. 5. Вид обрабатываемых участков спектра с различными соотношениями пик/фон.

Рис. 4. Зависимость площади пика от параметра σ_c . Расчет пика /рис. 2а, б/ по данной методике /кривые 1, 3/ и по методике ^{1/2} /кривые 2, 4/.

В заключение авторы выражают благодарность Ю.С.Замятину за обсуждение результатов и Г.Н.Флерову за интерес к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бутцева Г.Л. и др. В сб.: Программирование и математические методы решения физических задач. ОИЯИ, Д10,11-11264, Дубна, 1978, с.157-160.
2. Rossito F. Nucl.Instrum.Meth., 1970, 79, p.341-345.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 июня 1980 года.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники