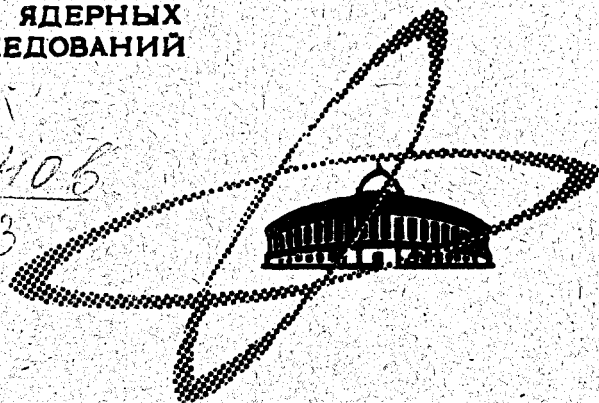


ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

218406

Г-13



P10 - 5035

В. Гаджоков

ОБРАБОТКА СПЕКТРОВ
ОТ Ge-Li -ДЕТЕКТОРОВ НА ЭВМ
(программа КАТОК)

ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ

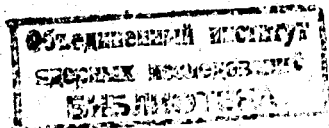
1970

P10 - 5035

В. Гаджоков

ОБРАБОТКА СПЕКТРОВ
ОТ Ge-Li -ДЕТЕКТОРОВ НА ЭВМ
(программа КАТОК)

Направлено в ПТЭ



1. Введение

Быстрое расширение возможностей применяемой в ядерной спектроскопии аппаратуры ставит с особой остротой вопрос об обработке накопленной цифровой информации. Повышение интереса к изучению ядер со все большим количеством радиационных переходов делает эту проблему еще более актуальной. Широко распространенная ручная графическая обработка спектров неудовлетворительна по нескольким причинам: она слишком медленна и трудоемка; в ней неизбежен субъективный элемент; она не приводит ни к каким оценкам погрешности интересующих экспериментатора параметров спектральных линий; ее результаты могут считаться надежными только в случае хорошо выделенных одиночных линий. Эти недостатки присущи почти в той же мере и элементарной цифровой обработке участков спектра с нахождением центров тяжести пиков и их поканальных сумм при вычитании линейного фона /1/.

Более строгий подход к решению проблемы состоит в построении подходящей математической модели спектра и в нахождении таких параметров модели, при которых она как можно лучше аппроксимирует экспериментально снятый спектр.

2. Модель

Характер процессов, ответственных за регистрацию детектором γ -лучей определенной энергии E , является существенно статистическим. Можно ожидать, что при полном поглощении γ -квантов в детекторе распределение импульсов на выходе спектрометрического тракта будет гауссовым с дисперсией σ^2 и позицией максимума P :

$$N(x) = \frac{S}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\left(\frac{x-p}{\sigma\sqrt{2}}\right)^2}, \quad (1)$$

где S - площадь пика. Разделенная на эффективность $\epsilon(E)$, она является мерой интенсивности γ -лучей данной энергии.

Обычно для аппроксимации одиночного пика применяется распределение (1). Следует отметить, что этот подход не является наилучшим, т.к. пики от Ge-Li детекторов обычно узки (σ в пределах 1,5 + 4 каналов) и необходимо учитывать интегрирование распределения (1) в пределах одного канала анализатора:

$$Y(q) = \frac{S}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{q-1}^q e^{-\left(\frac{x-p}{\sigma\sqrt{2}}\right)^2} dx. \quad (2)$$

Здесь q - номер канала, $Y(q)$ - число импульсов в q -м канале.

Если теперь рассмотреть участок спектра с границами q нач. и q кон., в котором расположено k пиков на фоновой подложке, выражаемой полиномом степени ℓ , то предлагается следующее представление зависимости $Y(q)$:

$$Y(q; \sigma, S_1, \dots, S_k, p_1, \dots, p_k, a_0, \dots, a_\ell) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \sum_{i=1}^k S_i \int_{q-1}^q e^{-\left(\frac{x-p_i}{\sigma\sqrt{2}}\right)^2} dx + \sum_{j=0}^{\ell} a_j q^j. \quad (3)$$

При этом предполагаем, что участок $[q_{\text{нач.}}, q_{\text{кон.}}]$ достаточно узок и дисперсии всех k пиков можно считать одинаковыми.

3. Постановка и особенности задачи

Пусть заданы зарегистрированные в каналах q участка $[q_{\text{нач.}}, q_{\text{кон.}}]$ числа импульсов Y_q . Согласно предложенному представлению (3):

$$Y(q; \sigma, S_1, \dots, S_k, p_1, \dots, p_k, a_0, \dots, a_\ell) = Y_q \quad (4)$$

$$q \in [q_{\text{нач.}}, q_{\text{кон.}}],$$

т.е. мы имеем переопределенную систему нелинейных уравнений относительно неизвестных $\sigma, S_1, \dots, S_k, p_1, \dots, p_k, a_0, \dots, a_\ell$. Подчеркнем, что уравнения системы (4) не точны - их правые части подвержены разбросу, оцениваемому как $\sqrt{Y_q}$, и поэтому каждому уравнению можно приписать статистический вес $w_q = 1/Y_q$. Требуется найти такое приближенное решение (4), которое минимизирует квадратичный функционал

$$\Theta = \sqrt{\frac{\sum_{q=q_{\text{нач.}}}^{q_{\text{кон.}}} [Y_q - Y(q)]^2 w_q}{i - \nu}} \quad (5)$$

Здесь $i = q_{\text{кон.}} - q_{\text{нач.}} + 1$ - число уравнений, а $\nu = 2k + \ell + 2$ - число неизвестных; ($i > \nu$).

В общем случае неизвестным является также число пиков k (сложный участок спектра с перекрывающимися линиями). Что касается дисперсии σ^2 , то она обычно хорошо оценивается по интенсивным пикам в рассматриваемом участке или смежных с ним.

В большинстве случаев фон достаточно хорошо аппроксимируется линейной функцией. Однако поскольку в фоновый полином здесь включены и комптоновские спектры более высокоэнергетических пиков, то иногда монотонность фоновой функции может нарушаться. В таком случае следует проявлять особую осторожность в выборе полинома. Высокая его степень l опасна тем, что полином может вести себя достаточно свободно и исказить значения параметров пиков (в первую очередь - их площадей). Этого можно было бы избежать, применив процедуру предварительной статистической оценки и вычитания фона^{12/} или же, что еще лучше, при аппаратурном вычитании фона (антикомптоновские спектрометры).

Сформулированная таким образом задача нелинейна относительно искоемых параметров. Располагая некоторыми начальными приближениями неизвестных, можно попытаться применить для ее решения метод Ньютона. Однако на практике такой вычислительный процесс очень часто является расходящимся, т.к. исходные уравнения системы возмущены, а линейные шаги процедуры плохо обусловлены. Физически это соответствует большому разбросу точек спектра и наложению близких пиков. В случае же неизвестного числа пиков k метод Ньютона, равно как и любой из известных итерационных методов, вообще неприменим по причине априорной необусловленности упомянутых шагов.

4. Метод решения

Рассмотрим нелинейную систему уравнений

$$f(x) = 0; \quad f \in R^1; \quad x \in R^V; \quad f \in C^1. \quad (6)$$

Метод Ньютона (см., например /3/) состоит в применении итерационной формулы

$$x^{n+1} = x^n - [J^T(x^n)J(x^n)]^{-1} J^T(x^n) f(x^n), \quad (7)$$

где $J(x^n)$ - матрица Якоби для f в точке x^n , а T - знак транспонирования. Решением (6) при заданном x^0 является предел последовательности (7)

$$x^* = \lim_{n \rightarrow \infty} x^n, \quad (8)$$

если он существует и конечен. Как было указано выше, в большинстве случаев обработки спектров этот метод неприменим, т.к. последовательность (7) расходится.

Для решения нелинейной задачи (6) в случае необратимости оператора $J^T J$ используем метод построения регуляризованного вычислительного процесса Ньютона-Канторовича. Этот метод предложен и обоснован Л. Александровым; суть его в нашем случае состоит в следующем: последовательные приближения решения системы (6) строим не по (7), а по формуле

$$x^{n+1} = x^n - [J^T(x^n)J(x^n) + \alpha_0 e^{-\omega n} E]^{-1} J^T(x^n) f(x^n), \quad (8)$$

где E — единичная матрица ранга ν ; $\alpha_0 > 0$ и $\omega \geq 0$ — подходящим образом выбранные константы, одинаковые для широкого класса задач (например, для всех участков спектров независимо от статистики и количества пиков в них).

Каждой итерации с номером $n \geq d$ сопоставляется невязка длины d

$$\Theta_d^{(n)} = \sum_{i=1}^d t_i \Theta_{n-i+1}^{(n)}, \quad (10)$$

где t_i — положительные весовые коэффициенты, а

$$\Theta_n = \sqrt{\frac{f^T(x^n)f(x^n)}{i-\nu}}. \quad (11)$$

Решением (6) считается по определению то x^{n^*} , для которого

$$\Theta_d^{(n^*)} = \min_{n \in [d, \infty)} \Theta_d^{(n)}. \quad (12)$$

Учитывая неодинаковую точность уравнений конкретной системы (4), определяем матрицу статистических весов

$$W = \text{diag} (w_1, w_2, \dots, w_1) \quad (13)$$

и применяем формулы (7), (9) и (11) в виде:

$$x^{n+1} = x^n - [J^T(x^n)WJ(x^n)]^{-1} J^T(x^n)Wf(x^n), \quad (7a)$$

$$x^{n+1} = x^n - [J^T(x^n)WJ(x^n) + \alpha_0 e^{-\omega_n} E]^{-1} J^T(x^n)Wf(x^n), \quad (9a)$$

$$\Theta_n = \sqrt{\frac{f^T(x^n)Wf(x^n)}{i - \nu}}. \quad (11a)$$

Метод Александра применим и к вырожденным задачам, что дает возможность объективно определить число пиков k в обрабатываемом участке. Для этого достаточно задать k достаточно большим - тогда некоторые из пиков получаются с одинаковыми позициями p_i (их дисперсии σ_i^2 одинаковы априори), что означает, что истинное число пиков меньше заданного настолько, сколько есть в участке повторяющихся позиций. Естественно, в таких случаях площади пиков с одинаковыми p_i необходимо сложить.

5. Программа "КАТОК"

Описанный алгоритм реализован в программе "КАТОК" для ЭВМ Минск-2. Программа предназначена для серийной обработки заранее размеченных и записанных на магнитную ленту участков спектра. Формат записи и структура информации в участках - стандартные, хотя длина их может варьироваться в пределах от 10 до 96 каналов и в них

может находиться от 1 до 14 пиков с фоновым полиномом степени от 1 до 5^{x/}.

Режим работы программа выбирает сама по следующей схеме. После ввода (с контролем) очередного участка рассчитываются статистические веса отдельных уравнений системы и из данных разметки определяются начальные приближения x^0 искомых параметров. Проводится автоматическая перенормировка площадей пиков с тем, чтобы элементы матрицы Якоби $J(x^0)$ оказались близкими по порядку числами. Закончив этим фазу подготовки к счёту, программа переходит к режиму NEWTON и в случае сходимости ведёт расчёт до конца. Если же обнаружится расходимость, то восстанавливается вектор x^0 и происходит переключение в режим счёта SKATE по алгоритму регуляризованного вычислительного процесса. В случае сходимости расчёт доводится до конца, а при расходимости обрабатываемый участок выводится на печать с указанием, что задача для него не решена (режим DUMP) и считывается для обработки следующий участок. Останов происходит по окончании обработки всех участков, число которых было задано в начале работы с пульта машины, а также при обнаружении ошибок во входной информации. Погрешности искомых параметров рассчитываются по известной процедуре^{/4/}.

Любопытно отметить, что с момента запуска программы было обработано около 500 участков различных спектров и при этом режим DUMP не использовался ни разу.

В качестве примера приведем результаты обработки участка спектра ¹⁷⁵Ta длиной в 26 каналов, на котором было размечено 4 пика. Машина оценила их дисперсию в 2,76 канала, что хорошо согласуется с дисперсией одиночных пиков на соседних участках; позиции же пиков оказались следующими:

^{x/} Разметка осуществляется на display -установке со световым пером по программе, составленной М. Фоминых.

$$p_1 = 1348,698 \pm 0,178,$$

$$p_2 = 1348,727 \pm 0,203,$$

$$p_3 = 1348,686 \pm 0,176,$$

$$p_4 = 1351,267 \pm 0,105,$$

откуда следует однозначное заключение, что число пиков на рассматриваемом участке равно двум.

6. Заключение

Реализованный в программе "КАТОК" алгоритм является мощным и единственно подходящим средством анализа сложных участков спектров с неизвестным числом перекрывающихся линий. "КАТОК" - первая реализация этого алгоритма; в сочетании с системой display и программой разметки участков спектра "КАТОК" значительно повышает эффективность и взаимосвязь в комплексе "человек-машина", внося качественно новый элемент в рутинную процедуру обработки экспериментальных данных.

По-видимому, точность получаемых результатов возможно повысить на основе усовершенствования математической модели (учёт асимметрии), а также путем предварительного вычитания существенной части фоновой подложки спектра.

Автор выражает свою искреннюю благодарность Й. Звольскому за постоянный интерес к работе.