

5776

ЭКЗ. ЧИТ. ЗАЛА

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P10 - 5776



Э. Рупп

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ  
МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ  
ДЛЯ ОПИСАНИЯ ФОРМЫ ЛИНИЙ  
ПРИ ОБРАБОТКЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ  
ГАММА- И БЕТА-СПЕКТРОВ

ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ

1971

P10 - 5776

Э. Рупп

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ  
МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ  
ДЛЯ ОПИСАНИЯ ФОРМЫ ЛИНИЙ  
ПРИ ОБРАБОТКЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ  
ГАММА- И БЕТА-СПЕКТРОВ

Научно-техническая  
библиотека  
ОИЯИ

Модели для описания формы линии экспериментальных  
гамма- и бета-спектров

В настоящей работе рассматриваются четыре разные функции для описания формы линии экспериментального спектра. Самая простая функция, которая хорошо описывает гамма-спектры и вообще спектры симметричного типа, это функция Гаусса. Ожидаемое число импульсов  $f_j$  в канале  $N_j$ , включая фон, может быть выражено в следующем виде:

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

где:  $P = 2 (\ln 2)^{1/2}$ ;

$d$  - полуширина;

$A$  - начальный номер канала в участке;

$m$  - количество пиков в участке;

$S$  - степень полинома, описывающего фон;

$N_k$  - положение максимума (в каналах);

$S_k$  - площадь пика;

$\alpha_\ell$  - коэффициент фона;

$0 < k \leq m$  ;  $0 < \ell \leq S$ .

При обработке с использованием функции (I) определяемыми параметрами являются

$$d, N_1, S_1, N_2, S_2, \dots, N_m, S_m, \alpha_1, \dots, \alpha_S. \quad (2)$$

В дальнейшем нужны будут производные от функции  $f_j$  по этим параметрам:

$$\frac{\partial f_j}{\partial d} = \frac{P}{d^2} \left\{ \sum_{k=1}^m S_k \exp(-E_{k,j}) [2E_{k,j} - 1] \right\}; \quad (3)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial N_k} = \frac{8(\ln 2) P}{d^3} (N_j - N_k) S_k \exp(-E_{k,j}); \quad (4)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial S_k} = \frac{P}{d} \exp(-E_{k,j}); \quad (5)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial \alpha_i} = (N_j - A)^{i-1}, \quad (6)$$

где 
$$E_{k,j} = \left\{ 2(\ln 2)^{1/2} \frac{N_j - N_k}{d} \right\}^2$$

Обработка производится более точно, если вместо степенной функции (I) использовать непрерывную функцию, полученную путем интегрирования  $\int I/$  по каналам:

$$f_j = \frac{P}{d\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^m S_k \int_{N_j-0,5}^{N_j+0,5} \exp\left\{-\left(\frac{P}{d}(x-N_k)\right)^2\right\} dx + \sum_{l=1}^s \alpha_l \int_{N_j-0,5}^{N_j+0,5} (x-A)^{l-1} dx$$

Эту функцию можно переписать в более удобном для счета виде:

$$f_j = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^m S_k \int_{a_{k,j}}^{b_{k,j}} e^{-y^2} dy + \sum_{l=1}^s \frac{\alpha_l}{l} [(N_j+0,5-A)^l - (N_j-0,5-A)^l], \quad (7)$$

где 
$$a_{k,j} = \frac{P}{d} (N_j - N_k - 0,5),$$

$$b_{k,j} = \frac{P}{d} (N_j - N_k + 0,5).$$

Производные функции (7) по определяемым параметрам (2):

$$\frac{\partial f_j}{\partial d} = \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^m S_k (a_{k,j} e^{-a_{k,j}^2} - b_{k,j} e^{-b_{k,j}^2}); \quad (8)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial N_k} = \frac{P^2}{d^2\sqrt{\pi}} S_k (e^{-a_{k,j}^2} - e^{-b_{k,j}^2}); \quad (9)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial S_k} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{a_{k,j}}^{b_{k,j}} e^{-y^2} dy; \quad (10)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial a_\ell} = \frac{1}{\ell} \left[ (N_j + 0,5 - A)^\ell - (N_j - 0,5 - A)^\ell \right]. \quad (II)$$

Для описания спектров конверсионных электронов, полученных при помощи бета-спектрографов и бета-спектрометров, а также гамма-спектров, снятых при помощи неидеальной аппаратуры, используются, кроме симметричных функций типа (I) и (7), разные асимметричные функции. Мы рассматривали применимость следующей асимметричной функции [2/,/3/]:

$$f_j = 4 \sum_{k=1}^m F_k \left\{ \exp \left[ -\frac{N_j - N_k}{5(1+\alpha)} \right] + \exp \left[ \frac{N_j - N_k}{5(1-\alpha)} \right] \right\}^2 + \sum_{\ell=1}^5 a_\ell (N_j - A)^{\ell-1}. \quad (I2)$$

Кроме ранее указанных значений, здесь:

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

$5 = \frac{d}{1,76}$  ;

$\alpha$  - коэффициент асимметрии.

При обработке спектров функцией (I2) определяются следующие параметры:

$$d, N_1, F_1, N_2, F_2 \dots N_m, F_m, a_1, \dots, a_5, \alpha. \quad (I3)$$

Площадь пика можно вычислить по формуле, предложенной В.Гаджоковым:

$$S_k = 2 \cdot 5 F_k (1 - \alpha^2) \frac{\pi \alpha}{\sin \pi \alpha}. \quad (I4)$$

Производные функции (I2) по параметрам (I3) следующие:

$$\frac{\partial f_j}{\partial d} = \frac{1}{1,76} \frac{8}{5^2} \sum_{k=1}^m \frac{F_k (N_j - N_k)}{(R_{j,k} + S_{j,k})^3} \left\{ \frac{S_{j,k}}{1-\alpha} - \frac{R_{j,k}}{1+\alpha} \right\}; \quad (I5)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial N_k} = \frac{8 F_k}{5 (R_{j,k} + S_{j,k})^3} \left\{ \frac{S_{j,k}}{1-\alpha} - \frac{R_{j,k}}{1+\alpha} \right\}; \quad (I6)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial F_k} = 4 (R_{j,k} + S_{j,k})^{-2}; \quad (I7)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial a_\ell} = (N_j - A)^{\ell-1}; \quad (I8)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial \alpha} = -\frac{8}{5} \sum_{k=1}^m \frac{F_k(N_j - N_k)}{(R_{j,k} + S_{j,k})^3} \left\{ \frac{S_{j,k}}{(1-\alpha)^2} + \frac{R_{j,k}}{(1+\alpha)^2} \right\}, \quad (19)$$

где  $R_{j,k} = \exp\left(-\frac{N_j - N_k}{5(1+\alpha)}\right);$

$$S_{j,k} = \exp\left(\frac{N_j - N_k}{5(1-\alpha)}\right).$$

Для описания гамма-спектров может быть также использована асимметричная функция /4/ в виде:

$$f_j = \frac{P}{d\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^m S_k \left\{ \exp\left[-\left(\frac{P}{d}(N_j - N_k)\right)^2\right] - \alpha_q \left(\frac{N_j - N_k}{d} + 1\right) \cdot \exp\left(\frac{N_j - N_k}{d} + 1\right) \right\} + \sum_{l=1}^s \alpha_l (N_j - A)^{l-1}, \quad (20)$$

где  $\alpha_q = 0$  если  $N_j \geq N_k - d,$

$\alpha_q > 0$  если  $N_j < N_k - d.$

Можно переписать функцию (20) в виде:

$$f_j = (f_j)_s - \alpha_q \frac{P}{d\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^m S_k K_{k,j} \exp(K_{k,j}), \quad (20a)$$

где  $K_{k,j} = \left(\frac{N_j - N_k}{d} + 1\right)$

и  $(f_j)_s$  - функция (I).

Производные по параметрам с помощью (3), (4), (5) и (6) получаются в виде:

$$\frac{\partial f_j}{\partial d} = \left(\frac{\partial f_j}{\partial d}\right)_s + \alpha_q \frac{P}{d^2\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^m S_k K_{k,j}^2 \exp(K_{k,j}); \quad (21)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial N_k} = \left(\frac{\partial f_j}{\partial d}\right)_s + \alpha_q \frac{P}{d^2\sqrt{\pi}} S_k (K_{k,j} + 1) \exp(K_{k,j}); \quad (22)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial S_k} = \left(\frac{\partial f_j}{\partial S_k}\right)_s - \alpha_q \frac{P}{d\sqrt{\pi}} K_{k,j} \exp(K_{k,j}); \quad (23)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial a_i} = \left( \frac{\partial f_j}{\partial a_i} \right)_s, \quad (24)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial \alpha_r} = - \frac{P}{cl} \sum_{k=1}^m S_k K_{k,j} \exp(K_{k,j}). \quad (25)$$

Дальше обсуждаются результаты, полученные при обработке спектров с использованием функций (1), (7), (12) и (20). Кроме этих функций, в литературе имеется целый ряд других, наиболее интересные из которых для наших целей приведены в работах /5/, /6/.

#### Метод обработки и программы

Задачей обработки экспериментального спектра, содержащего  $F_j$  импульсов в  $N_j$  канале, является определение его характеристик, а именно: полуширины, позиции, площади и коэффициента асимметрии пиков, а также параметров фона. Форму спектра можно задать выражениями (1), (7), (12) или (20). Таким образом, данные  $F_j$  аппроксимируются значениями функции  $f_j$ , которая зависит от набора параметров, например (2) или (13). Параметры по экспериментальным данным находятся с помощью метода наименьших квадратов (МНК) /7/, /8/.

Метод состоит в поиске минимума функционала

$$M = \sum_{j=1}^n \omega_j (F_j - f_j(c_1, \dots, c_r, N_j))^2, \quad (26)$$

где  $n$  - число экспериментальных точек;

$r$  - число параметров;

$\omega_j$  - статистический вес, причем  $\omega_j = \frac{1}{\sigma_j^2}$ , где  $\sigma_j$  есть ошибка  $F_j$ .

При минимальном значении  $M$  производные функционала по па-

раметрам равняются нулю. Таким образом, имеем ряд уравнений для определения параметров  $C_1 \dots C_r$ . Поскольку обычно уравнения аналитически не решаются, пользуются методом итераций. Итерации продолжают до тех пор, пока точность определения параметров не достигнет величины погрешности, связанной со статистической обеспеченностью экспериментального спектра (подробнее см. <sup>/8/</sup>).

При определении параметров методом итераций быстрота сходимости решения существенно зависит от точности задания начальных значений параметров. Эти значения можно найти или при предварительной ручной обработке спектров, или определить программным путем. Первый способ требует значительного дополнительного труда, а для второго нужно иметь специальные программы и, соответственно, большие электронно-вычислительные машины.

Другую возможность для определения начальных значений параметров предоставляет предварительная обработка спектров с использованием осциллографа со световым карандашом <sup>/9/</sup>. Экспериментальные данные, накопленные предварительно и хранящиеся на магнитной ленте ЭВМ, вызываются на экран осциллографа. Производится так называемая "разметка", с помощью которой через символы на экране осциллографа выполняются программы, необходимые для отметки максимумов, минимумов, формы фона и других характеристик спектра.

Наша обработка с использованием МНК производится на ЭВМ БЭСМ-4. Предварительная обработка данных ("разметка") осуществляется на базе "Минск-2" со световым карандашом, имеющей специальное программное обеспечение, написанное М.И.Фоминных <sup>(\*)</sup>.

Целесообразно разделить и отдельно произвести определение

---

(\*) На ЭВМ "Минск-2" имеется программа для полной обработки по МНК с симметричной функцией (7), см. <sup>/10/</sup>.



начальных значений для параметров, подготовку экспериментальных данных и обработку по МНК. Именно обработку по МНК стоит проводить на более быстрых ЭВМ, чем Минск-2.

Для описания спектров мы пользовались параллельно функциями (1), (7), (12) и (20). Для наших программ исходным материалом является выдача со светового карандаша в стандартизованном виде. Программа вместе с МНК занимает один куб. Обработке может подвергаться участок с числом каналов не более 256, при числе определяемых параметров не больше 20. Это означает, что в случае, например, набора параметров (13) в данном участке может быть не больше 8 пиков, если фон линейный.

Программа состоит из двух частей: программы подготовки данных и "арифметики" (т.е. программы для моделирующей функции).

В программе подготовки данных находятся следующие блоки:

1. Ввод программы и констант.
2. Ввод данных.
3. Контроль исходного материала.
4. Определение числа экспериментальных точек.
5. Печать начала и конца данного участка, положения максимумов в каналах.
6. Вычисление и печать первоначальных значений для полуширины.
7. Вычисление параметров фона в первом приближении по заданной степени фона.
8. Определение числа искомых параметров.
9. Подготовка всей информации, т.е. данных и начальных значений параметров к виду, который требуется для стандартной программы МНК.

10. Вычисление весов для количества импульсов в каждом канале.

11. Печать программы и содержание рабочих ячеек.

12. Блок для проверки арифметики без МНК.

13. Обращение к МНК.

Общий вид арифметики:

1. Сама арифметика для данной функции.

2. Приготовление вызова для МНК.

3. Изменения в программе с целью подготовки данных для арифметики.

4. Проверка без МНК.

Блок контроля проверяет, находится ли исходная информация в таком виде, как требует программа. Для данного участка полуширина и коэффициент асимметрии берутся одинаковыми для всех пиков.

Вычисление весов для  $F_j$  производится по простому закону,  $\omega_j = \frac{1}{F_j}$ , а если  $F_j < 300$ , то всегда берется  $\omega_j = \frac{1}{300}$ . В арифметике вычисляются значения функции  $f_j$  и её производные по заданному набору параметров.

Степень фона может быть не больше 6.

Во время работы программы выход из итерации происходит по числу итераций или по заданной точности  $\epsilon > \max_k \left| \frac{\Delta c_k}{\sigma_k} \right|$ , здесь  $\Delta c_k$  — добавка к параметрам в данной итерации,  $\sigma_k$  — статистическая ошибка параметра. Практически достаточно иметь точность равной 1, мы выбирали её 0,25.

По желанию можно получить выдачу в разных видах. Вначале всегда печатаются первоначальные характеристики данного участка. Потом можно печатать, в каждой  $i$ -ой итерации, значение  $\chi^2$ , факторы корреляции, статистические ошибки, значения параметров и т.д. После

последней итерации можно выдавать вычисляемую функцию в каждом канале, а также матрицу ошибок.

### Обсуждение результатов

С помощью симметричных функций (1) и (7) были обработаны разные участки гамма-спектров. За исключением тех случаев, когда в одном пике находится менее 5 экспериментальных точек, результаты счета с (1) и (7) в пределах ошибок совпадают. Обычно при работе с функцией (7) количество итераций увеличивается приблизительно в 2 раза. Примеры из работы /12/ были обработаны с (7), результаты совпадают с результатами счета программы /10/.

Большое внимание уделялось описанию спектров конверсионных электронов. По одиночным пикам из одного спектра было проверено поведение коэффициента асимметрии  $\alpha$ , описанное в (12). От начала спектра (область низких энергий) к концу  $\alpha$  действительно уменьшается. Подробно исследовался участок бета-спектра, взятый из работы /11/ (см. рис.1). Результаты счета со 170 по 267 каналы показаны на рис.2. Участок обрабатывался и симметричной и асимметричной функцией, чтобы посмотреть отклонение от симметричной функции. Большая разница между экспериментальной и вычисленной кривой в некоторых минимумах объясняется тем, что там еще есть линии, но недостаточна статистика, чтобы их определить. Величина  $\chi^2$  оказалась больше, чем её ожидаемое значение, в частности, из-за вышеописанной разницы. Кроме того, максимум в 207 канале плохо определяется и добавка к  $\chi^2$  в каждой точке велика в начальной и конечной части участка. При обработке асимметричной функцией (12)  $\chi^2$  меньше, чем при обработке симметричной функцией (1) или (7), что естественно в силу асимметрии линий в бета-спектрах. Об этом также гово-

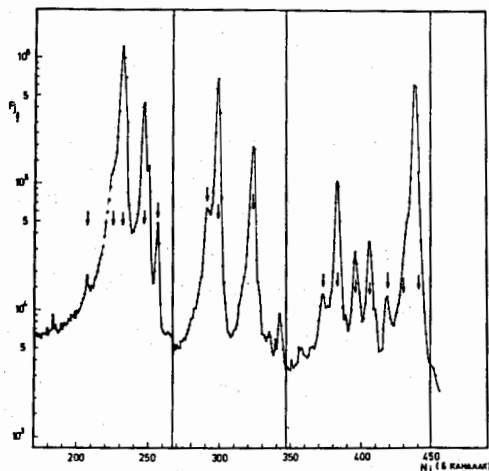


Рис.1 Пример из работы /II/. Стрелкой отмечены начальные значения для максимумов, указанные при разметке.

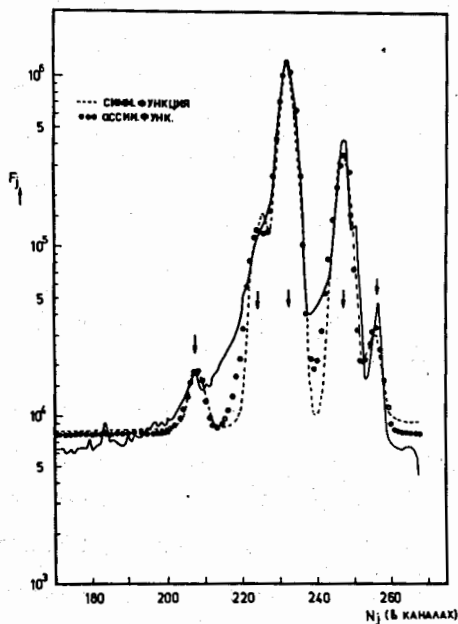


Рис.2 Участок бета-спектра для каналов 170-267. Пример из работы /II/. Отмечены результаты счета симметричной функцией (7) и асимметричной функцией (12).

рит положительное значение коэффициента асимметрии ( $\alpha = 0,353$ ). Рассматривалось изменение значений параметров в пределах своих статистических ошибок в последних итерациях, когда  $\chi^2$  почти уже не меняется. При этом оказалось, что нелинейность задачи незначительна. Участок 268-350 обрабатывался только с тремя пиками, а именно в 291, 209 и 323 каналах. При задании большего количества пиков обработка не шла, т.к. факторы корреляции оказывались большими и для решения задачи в этом участке информации не хватает. (Заметим, что этот участок выглядит иначе в нормальном масштабе, при котором пик в 343 канале практически не виден). Результаты счета участка 347-454 с функцией (7) и (12) приведены в таблице I. Заметим, что время счета этого участка, с функцией (7), на БЭСМ-4 6 мин 40 сек и дополнительно для печати 45 сек.

Асимметричная функция (20), описывающая гамма-спектры, состоит из симметричной части типа (I) и дополнительной экспоненциальной функции для описания асимметрии. Работа с этой функцией затруднена из-за условий, налагаемых на коэффициент асимметрии. В качестве примера в таблице II приведены результаты обработки участка гамма-спектра со всеми четырьмя функциями.

С точки зрения развития обработки представляется более правильным определять вначале точные значения параметров  $d$  и  $\alpha$  по одиночным пикам, а потом рассматривать их как константы и вести полную обработку для остальных параметров. Это более оправдано, так как эти величины имеют ошибки скорее систематического, чем статистического характера. Для такой обработки необходимо рассматривать спектр целиком, что приводит к требованию большой оперативной памяти у ЭВМ, на которой ведутся вычисления.

Выражаю благодарность М.И.Фоминых, З.Стахуре и В.М.Цупко-Ситникову за ценные замечания.

Результаты счета участка бета-спектра в каналах 347-454.  
Пример из работы /II/.

	количество итераций	$\chi^2/10^4$	$d$	$\alpha$	параметры фона		
ассим. функция (I2)	13	0,519	3,69±0,009	0,332±0,005	461±5	0,779±0,079	
симм. функция (7)	16	0,101	3,67±0,006		488±5	1,131±0,078	
Положения максимумов с ошибками							
ассим. функ. (I2)	373,9±0,04	384,0±0,02	396,9±0,03	406,8±0,02	419,7±0,0,5	433,0±0,03	440,1±0,01
симм. функ. (7)	373,2±0,04	383,2±0,01	396,1±0,02	406,0±0,02	418,9±0,06	433,5±0,02	439,5±0,003
Площади с ошибками /10 <sup>4</sup>							
ассим. функ. (I2)	0,423±0,010	3,90±0,04	1,031±0,016	1,19±0,01	0,328±0,009	1,44±0,03	26,2±0,2
симм. функ. (7)	0,399±0,009	3,68±0,02	0,959±0,012	1,10±0,01	0,288±0,008	2,25±0,02	24,7±0,05

Таблица 2

Результаты счета участка гамма-спектра в каналах 435-497.

	кол-во итер.	$\chi^2/10^3$	$d$	коэфф. ассим.	параметры фона	
ассим. функ. (I2)	9	0,499	5,83±0,05	$\alpha = 0,313 \pm 0,018$	$(0,878 \pm 0,011) \cdot 10^3$	-5,68±0,33
ассим. функ. (20)	8	0,340	5,65±0,04	$\alpha_q = 0,281 \pm 0,011$	$(0,795 \pm 0,013) \cdot 10^3$	-3,79±0,30
симм. функ. (I)	6	0,878	5,87±0,04		$(0,911 \pm 0,010) \cdot 10^3$	-4,90±0,30
симм. функ. (7)	13	0,878	5,82±0,04		$(0,912 \pm 0,010) \cdot 10^3$	-4,90±0,30
Положения максимумов с ошибками						
асимметричная функция (I2)		448,2±0,3		458,0±0,1	468,9±0,08	483,3±0,08
асимметричная функция (20)		446,4±0,3		456,1±0,3	467,3±0,09	482,0±0,02
симметричная функция (I)		447,5±0,3		457,2±0,1	467,9±0,05	482,0±0,02
симметричная функция (7)		447,5±1,2		457,2±0,5	467,8±0,2	482,0±0,06
Площади с ошибками /10 <sup>4</sup>						
асимметричная функция (I2)		0,134±0,015		0,289±0,013	0,932±0,036	3,63±0,13
асимметричная функция (20)		0,106±0,014		0,125±0,011	0,462±0,020	3,44±0,20
симметричная функция (I)		0,107±0,013		0,260±0,011	0,867±0,015	3,39±0,30
симметричная функция (7)		0,107±0,013		0,260±0,011	0,866±0,015	3,39±0,30

## Л и т е р а т у р а

1. H. Agvald. FOA 4 Rapport D 4060 28 April 1968.
2. Martha Stevens and J.A. Harvey. The EAS Nuclear Cross Section Advisory Group at the Meeting on November 10-11. 1966. held at Argonne Illions WASH-1071
3. И.Звольски, В.И.Приходько. Препринт ОИЯИ, Дубна 6-3517, 1967
4. V. Haase. Kernforschungszentrum Karlsruhe April 1968 KFK 730.
5. J.S. Geiger, R.L. Graham and M.W. Jones. Contribution to be presented at the XVIII Annual Conference on Nuclear Spectroscopy in Riga, USSR. January 25 to February 2 1968.
6. J.T. Routti and S.G. Prussin. Nucl. Instr. and Methods 72(1969) 125-142.
7. И.Н.Силин. Стандартная программа I23, Дубна, 1968
8. L. Janossy. Theory and Practice of the Evaluation of Measurements. Oxford, Clarendon Press, 1965.
9. Ф.Дуда, Э.Зайдлер, И.Томик, В.Р.Трубников, Ю.В.Тутышкин, М.И.Фоминих, В.М.Цупко-Ситников. Препринт ОИЯИ, Дубна IO-4977  
1970
10. В.Гаджиков. Препринт ОИЯИ, Дубна P10-5035, 1970
11. К.Вильский, В.В.Кузнецов, О.Б.Нильсен, О.Скилбрайт, В.А.Халкин  
Препринт ОИЯИ, Дубна P-2915, 1966.
12. Я.Вандлик, Н.Г.Зайцева, Э.Матэ, И.Махунка, М.Махунка, Т.Фенеш  
Препринт ОИЯИ Дубна, 6-4997, 1970

Рукопись поступила в издательский отдел  
7 мая 1971 года.