

6817

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна.



P10 - 6817

ЭКЗ. ЧИТ. ЗАЛА

Г.Элер, П.М.Гопыч, Г.В.Винель,
В.Хабенихт, Л.А.Вылова

ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ

ЭКСПРЕСС-ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ
СПЕКТРОВ "ЭПОС".
ОПИСАНИЕ БЛОК-СХЕМЫ

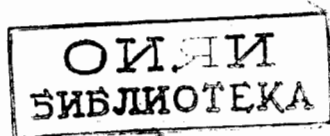
1972

P10 - 6817

Г.Элер, П.М.Гопыч, Г.В.Винель,
В.Хабенихт, Л.А.Вылова

ЭКСПРЕСС-ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ
СПЕКТРОВ "ЭПОС".
ОПИСАНИЕ БЛОК-СХЕМЫ

Направлено в ПТЭ



1. ВВЕДЕНИЕ

В работе предлагается система программ ЭПОС для быстрой обработки спектров, в основе которой лежит статистический метод подгонки. Применение экспресс-программ наиболее эффективно при решении задач автоматизации обработки спектрометрической информации как для контроля и управления экспериментом /в *on-line* режиме/, так и для решения самой проблемы обработки. С большой эффективностью возможно использование программы в прикладных исследованиях, использующих ядернофизические методы, например, в геологии.

В работе представлена в упрощенном виде блок-схема ЭПОС. Программа построена таким образом, что обработка спектра производится этапами по принципу от простого к сложному. От этапа к этапу с увеличением времени обработки становится более полным набор подлежащих определению параметров всех линий спектра и улучшается точность результатов. Результаты определенных этапов, полученные с минимальными затратами времени, могут быть применены в соответствии с их точностью для процесса контроля и управления.

В первой части программы /ЭПОС-1, рис. 1/ спектр подготавливается к обработке. Для хорошо выделяющихся пиков приблизительно определяются положения и амплитуды. Для удобства обработки весь спектр делится на интервалы. Во многих случаях приближенные результаты ЭПОС-1, полученные без подгонки, могут предоставить ценную информацию о ходе эксперимента.

Для сильно перекрывающихся пиков точность результатов очень чувствительна к точности, с которой известна их полуширина. Поэтому во второй части программы /ЭПОС-II, рис. 2/ будут обработаны только интервалы, содержащие небольшое число /один или два/ хорошо изолированных пиков. Для таких пиков положение, амплитуда и полуширина определяются путем подгонки очень точно.

При достаточном числе изолированных пиков можно с хорошей точностью вычислить зависимость полуширины от энергии и затем при обработке более сложных участков спектра в третьей части программы /ЭПОС-III, рис. 3/ пользоваться теоретическим значением полуширины. Это существенно облегчает идентификацию мультиплетов /сильно перекрывающихся пиков/. В предлагаемом варианте программы содержатся два ограничения.

а/ Предполагается, что форма пиков хорошо описывается симметричной гауссовой кривой. Так как для гамма-спектров, полученных с хорошими полупроводниковыми детекторами и хорошей электроникой, это условие обычно выполнимо, то программа без изменений и дополнений пригодна для обработки большей части встречающихся в практике случаев. Схема программы позволяет в качестве дополнения к ЭПОС-II включение алгоритма автоматического определения параметров несимметричной функции, наиболее подходящей для описания формы пиков. В настоящее время в этом направлении проводятся исследования, после окончания которых программа может быть расширена на случай несимметричной формы пиков.

б/ Вычисления прекращаются для участков спектра, порядок мультиплетов которых больше трех. С ростом мультиплетности уменьшается достоверность получаемой физической информации. Поэтому можно считать, что при обработке, включающей триплет, извлекается преобладающая часть информации, содержащейся в спектре, и, в частности, та ее часть, которую можно получить с большой точностью. В дальнейшем предусматривается распространить статистический метод, использованный в программе, на мультиплеты более высоких порядков. С этой целью будут проведены исследования, которые при удовлетворительных результатах приведут к созданию четвертой части программы для обработки участков спектра, которые в ЭПОС-III отмечены как необработанные.

При создании программы ЭПОС главное внимание было направлено на достижение высокой скорости счета. Использованный метод подгонки позволил повысить скорость обработки, в зависимости от степени сложности, на один-два порядка по сравнению с программами, работающими по методу наименьших квадратов ^{/3/}, методу градиентов ^{/4/} или применяющих метод анализа Фурье ^{/5/}. Структура и режим работы большей части процедур определяются методом подгонки.

2. ОПИСАНИЕ БЛОК-СХЕМЫ ПРОГРАММЫ

Ввод информации в программу /рис. 1/ предусматривает три следующих возможности, которыми можно пользоваться, выбрав соответствующим образом величину cal /калибровка/.

а/ Если для энергетической калибровки должны быть применены результаты предыдущих расчетов параметров калибровочной кривой (a_0, a_1, a_2) , то дополнительно к ним задаются границы k_1 и k_2 подлежащего обработке спектра, а также экспериментальные значения $eks[1:k_2-k_1+1]$. В этом случае ($cal=0$) будет произведена внешняя калибровка /2/.

б/ Если необходимо провести внутреннюю энергетическую калибровку ($cal=1$), то дополнительно к предыдущему вводится число калибровочных энергий n и их значения $ce[1:n]$ /4/. В этом случае автоматически выбираются линии, соответствующие калибровочным энергиям /11/, и вычисляются параметры калибровочной кривой a_0, a_1, a_2 /12/.

в/ Для контроля работы программы и отдельных процедур, а также с целью дальнейшего развития отдельных алгоритмов в программе заложена возможность конструкции спектров с заданными параметрами. В этом случае ($cal \neq 1$) вызывается процедура $spekt$ /5/. Для конструкции спектра необходимо задать коэффициенты для описания фона полиномом 3-ей степени, положения всех пиков, их амплитуды, а также коэффициенты зависимости разрешающей способности детектора от номера канала. По желанию такой спектр конструируется со статистическими флуктуациями.

После ввода экспериментального спектра /или после конструкции спектра/ вызывается процедура $supik$ /6/. С ее помощью определяются положения всех пиков, для которых первая производная по энергии проходит через нуль. Сильно перекрывающиеся пики, например, такие, которые имеют сравнимые значения амплитуд и расстояние между которыми меньше их полуширины, не разделяются и интерпретируются как один пик. После нахождения в /6/ положений $pe[1:pik]$ /в каналах/ всех содержащихся в спектре хорошо изолированных пиков в процедуре $intval$ /7/ будет определено среднее значение полуширины всех пиков b , и для дальнейшей обработки спектр будет разделен на интервалы в тех местах, где расстояние между соседними пиками составляет несколько только что найденных значений средней полуширины. Для m -ого интервала определяются число линий в интервале $npt[m]$, номер первого канала интервала

$nukt[m]$ и число каналов в нем $kt[m]$. В процедуре *fona* /8/ сначала делается попытка описать фон полиномом 3-ей степени для всего спектра в целом. Для этого используются экспериментальные значения в каналах, соответствующих точкам чистого фона, найденных также в /8/. Если такое описание принципиально невозможно /для описания фона нужен полином более высокого порядка/, или если число имеющихся для этого точек недостаточно, то фон аппроксимируется прямой для каждого интервала в отдельности. С помощью найденных приближенных значений положений пиков и параметров фона в процедуре *ampli* /9/ приближенно вычисляются амплитуды пиков.

Если должна проводиться внутренняя энергетическая калибровка ($cal=1$), то в процедуре *wybor* происходит автоматический поиск линий, соответствующих заданным калибровочным энергиям, а в процедуре *quad* /12/ методом наименьших квадратов находятся коэффициенты a_0, a_1, a_2 полинома 2-ой степени, с помощью которого может быть описана зависимость энергии от номера канала. После этого возможен пересчет всех значений положений пиков pe /в каналах/ в соответствующие значения энергий линий en /в кэв/. В случае внешней калибровки ($cal=0$) этот пересчет производится с помощью коэффициентов, найденных при последней внутренней калибровке. Оба случая $cal=0$ и $cal=1$ дают возможность для ряда следующих друг за другом измерений создать режим, при котором в периодической последовательности, после нахождения путем измерения спектра стандартных изотопов коэффициентов a_0, a_1, a_2 , обрабатывается определенное число спектров с применением внешней калибровки. Зависящие от времени флуктуации в коэффициентах a_0, a_1, a_2 могут служить для контроля стабильности измерительной аппаратуры.

Найденные до сих пор энергии и амплитуды линий используются при дальнейшей обработке спектра в качестве исходных параметров для их более точного определения. Если достигнутая при получении исходных энергий и амплитуд точность считается достаточной, или если в случае сложных измерений является желательным контроль за проводимым экспериментом, то в данном месте программы возможен вывод результатов, полученных в минимально короткое время. Поэтому в процедуре *resum* /14/ полученные значения подготавливаются к печати. Так как амплитуды пиков не имеют физического смысла, то при помощи найденной средней полуширины b из амплитуд пиков вычисляются их интенсивности. Естественно, что

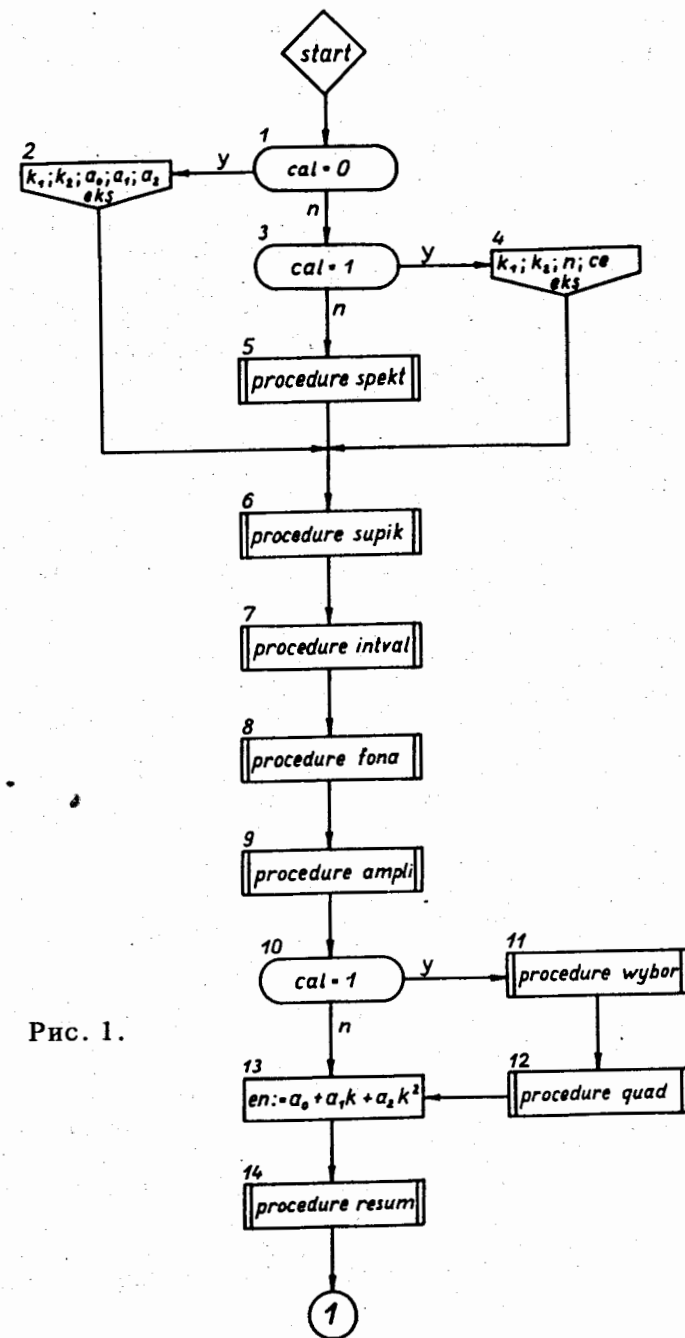


Рис. 1.

при этом получают систематические отклонения от действительных значений, и полученные интенсивности обладают существенно большими ошибками, чем энергии линий.

Причиной проведения энергетической калибровки с приближенными значениями положений пиков является необходимость учета комптоновских ступенек дополнительно к уже найденным пикам полного поглощения. Для этого необходимо иметь абсолютное значение энергий линий. В процедуре *compton/15/* исследуются все те области спектра, в которых ожидается вклад от линий, вызывающих комптоновский эффект. В случае необходимости в данном интервале описание спектра будет дополнено соответствующим описанием комптоновских ступенек. Влияние одной комптоновской ступеньки может при этом распространяться на несколько интервалов.

После приготовлений, проведенных в ЭПОС-1, начинается окончательная обработка спектра. Следующая часть программы - ЭПОС II /рис. 2/ служит для точного определения зависимости разрешающей способности от энергии $b(E)$. Для этого выбираются только такие интервалы, которые содержат малое число хорошо изолированных пиков. В процессе подгонки для таких пиков с высокой точностью находятся, кроме положений и амплитуд, их полуширины, которые служат для определения аналитической зависимости разрешающей способности от энергии. В /16/ определяются исходные значения для индексов суммирования и характеристики интервалов. При этом m означает номер интервала; npr - общее число пиков в первых $(m-1)$ интервалах, num - число хорошо изолированных пиков, $mult$ характеризует требуемое в цикле число пиков в интервале, $nzt[m]$ принимает значение, равное нулю, если интервал с номером m берется в дальнейшем для определения зависимости $b(E)$, в противном случае $nzt[m]$ отлично от нуля.

При $m=1$ /17/ начинается обработка отдельных интервалов. Пока $m < int/18/$, вследствие $mult=1$, выбираются только интервалы с одиночными пиками /19/ и в процедуре *parlim* /21/ вычисляются исходные параметры, необходимые для процесса подгонки. При этом из экспериментальных значений вычисляется величина добротности спектра aa , регулирующая ход процесса подгонки / aa характеризует качество статистики в спектре и отношение величин амплитуд пиков к величине фона/. Если значение χ^2 (*clim*), подсчитанное с помощью определенных в /21/ параметров, много больше aa /22/, то в процедуре *vybros* /23/ проверяется, не являются ли причиной

этого большого значения $clim$ выбросы в отдельных каналах. В подобном случае /24/ для таких каналов значение eks подсчитывается как среднее двух соседних экспериментальных значений, и с помощью $supik$ /25/ и $ampli$ /26/ в рассматриваемом интервале вновь определяются положения пиков и их амплитуды. Ложные пики исключаются /27/, а для оставшихся в /21/ вновь определяются исходные параметры. Если опять получится большое значение $clim$, то причиной этого может быть только не найденный до сих пор пик /пики/, т.к. выбросов теперь нет ($vyb = 0$). Для такого случая /24/ процесс подгонки будет обойден. Отыскиваются дополнительные пики /30/. Поиск последних производится и тогда, когда результат процесса подгонки неудовлетворителен /29/. Процедура fit /28/, в которой применяется описанный в^{1/} статистический метод подгонки, вызывается только тогда, когда в интервале с большой вероятностью ожидается один пик ($clim \leq 10 aa$). В случае хорошей подгонки на интервале с номером m после соответствующего увеличения числа уже рассмотренных пиков npr /35/ происходит переход /36/ к следующему интервалу, такому, который вследствие /19/ также содержит только один пик. В случае плохой подгонки в процедуре $cheops$ для каждого канала в интервале вычисляется значение χ^2 . После применения к этому производному спектру метода поиска пиков /31/ получают дополнительную информацию о структуре данного участка в виде пиков в функции χ^2 . Если такие пики ($pic > 0$) будут найдены, то этот интервал в /33/ будет отмечен как содержащий больше одного пика $nzt[m] \neq 0$ и его обработка приостанавливается. В /34/ определяется число интервалов, содержащих один изолированный пик num . Когда описанным образом будет рассмотрен весь спектр до последнего интервала ($m = int$), в /40/ опрашивается, достаточно ли число найденных в процессе подгонки точных значений полуширины ($num \geq 6$), чтобы в процедуре $quabe$ /43/ методом наименьших квадратов провести точное определение функции разрешающей способности $b(E)$. Если num окажется мало, тогда в /41/ опознавательная величина $mult$ увеличивается на единицу и описанным выше образом обрабатываются все интервалы, содержащие два пика. Чтобы и в этом случае можно было получить точные результаты, после /20/ проводится проверка дополнительного условия на хорошую изолированность пиков /38/. Далее рассмотрены будут только те расстояния dis , между которыми окажется больше $2,5 b$. Если после всего условие $num \geq 6$ выполнено, то зависимость $b(E)$ может

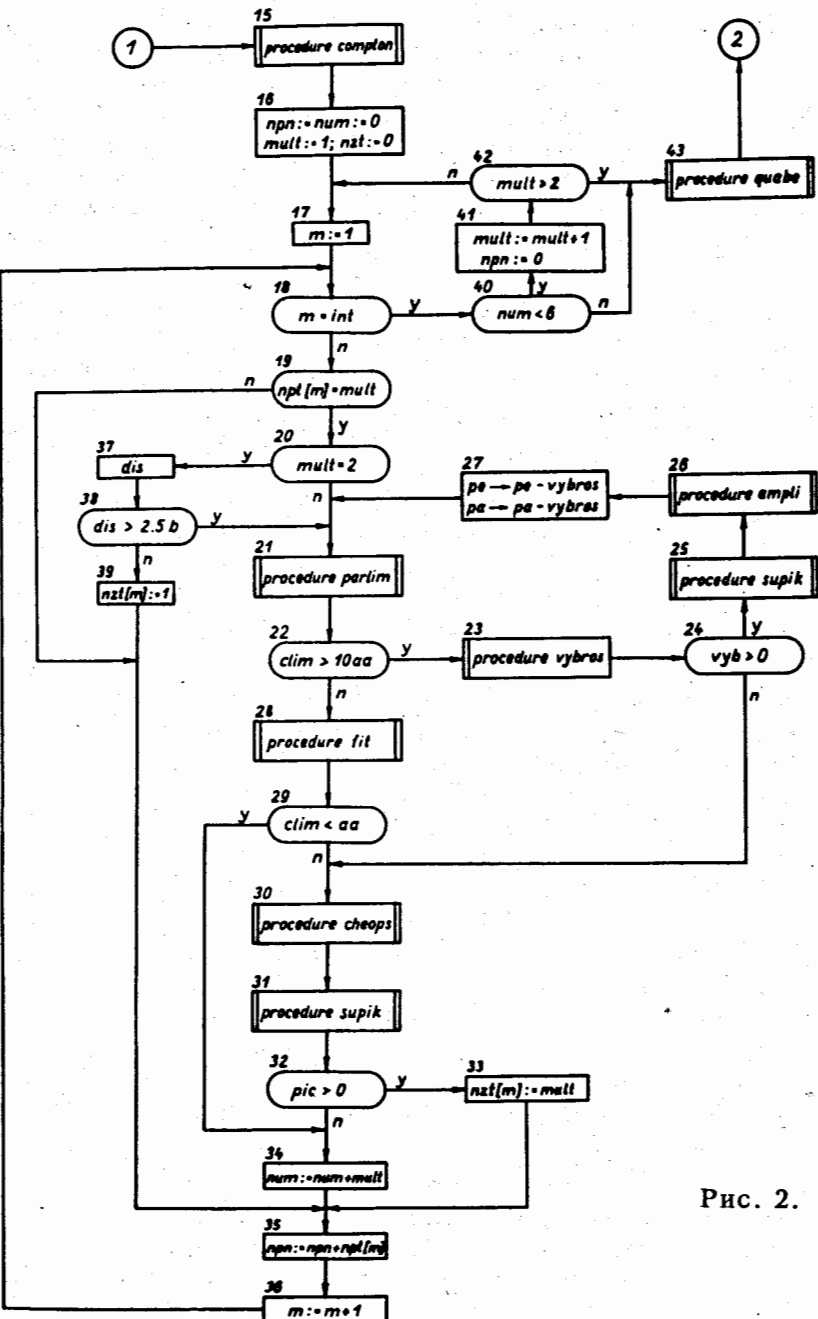


Рис. 2.

быть определена точно. В противном случае в процедуре *quabe*/43/ проводится приближенное вычисление этой зависимости. Так как точность в определении $b(E)$ является решающей при обработке более сложных участков спектра, то экспериментатору указывается на факт приближенного вычисления /44/ и рекомендуется /45/ ввод спектра с большим числом хорошо изолированных пиков для точного определения $b(E)$. На рис. 3 это представлено символическим переходом к *start*.

В третьей части программы /ЭПОС III/ производится обработка всех до сих пор пропущенных интервалов /рис. 3/. Полуширина при этом не является больше свободным параметром, ее значение задается функцией $b(E)$.

Цикл обработки отдельных интервалов вновь начинается значением $m=1$ /47/, причем условием $npt[m] > mult$ или двумя условиями $nzt[m] > 0$ и $npt[m] \leq mult$ /50/ выбираются только не рассмотренные до сих пор интервалы. Вычисления /51...60/ проводятся аналогично уже описанному в ЭПОС II. При хорошей подгонке /59/ происходит переход к следующему интервалу /83,84/. При плохом *clim* /52/ вначале проверяется, имеются ли в отдельных каналах подлежащие устранению выбросы /54...57/. Если и после этого в процессе подгонки не достигается удовлетворительный результат, то конструируется спектр значений χ^2 /60/ и отыскиваются пики в этом спектре /62/. Чтобы не идентифицировать в качестве пиков флуктуации в χ^2 , лежащие в области статистических ошибок, в /62/ устанавливается пороговое значение *niv*. Встречающиеся ниже него максимумы χ^2 не рассматриваются как пики. Если с данным пороговым значением пики не были найдены (*pic* = 0), то вследствие невыполненного условия /64/ процесс поиска будет повторен еще два раза. При этом *niv* каждый раз будет уменьшено до половины его предыдущего значения /65/. Если несмотря на это не найдено ни одного пика, то неудовлетворительное значение *clim* может возникать только из-за вкладов одного порядка во всех каналах. Поиск дополнительных пиков прекращается, и происходит переход к следующему интервалу в силу условия /66/. Если пики в χ^2 найдены (*pic* > 0), то с помощью процедуры *subint* /67/ данный интервал делится на подинтервалы. Такое разделение происходит на основе структуры χ^2 -спектра в тех местах, где между соседними пиками в χ^2 имеется максимальное расстояние, исключаящее взаимное перекрытие. В результате интервал оказывается разделенным на подинтервалы, содержа-

щие дублиеты и триплеты, обработка которых продолжается дальше. Подинтервалы, содержащие на основе структуры в χ^2 -спектре более трех пиков, в ЭПОС III снабжаются только метками и не обрабатываются.

При $sm = 1$, /68/ во внешнем цикле начинается внутренний цикл обработки подинтервалов. В /67/ происходит присвоение значения $multi = 1$, если пики вследствие больших расстояний между ними и χ^2 -пиками не перекрываются или только слабо перекрываются. В этом случае из χ^2 -пиков вычисляются начальные параметры дополнительных пиков, подгонка которых в данном случае достигается в процедуре *fit* /71/. Если это все же невозможно /72,73/, или если в /67/ найден по меньшей мере дублет ($multi = 2$), тогда для подгонки вызывается процедура *dufit* /75/, в основе которой лежит тот же статистический метод, что и в *fit*. Так как для дублетов и триплетов получаются аналогичные χ^2 -спектры, их невозможно различить в /67/. Поэтому процедура *trifit* /79/ вызывается только тогда, когда результат /75/ неудовлетворителен. Во всех случаях, где $clim < aa$, происходит переход к следующему подинтервалу /82/. Если подгонка триплета также не ведет к цели, то перед обработкой следующего подинтервала такой трудный участок спектра будет отмечен как необработанный присвоением ему значения $multi = 4$. После окончания этого внутреннего цикла во внешнем цикле берется следующий интервал до тех пор, пока не закончится обработка всего спектра, т.е. когда $m = int / 48/$.

В процедуре *sort* /85/ происходит перегруппировка пиков соответственно их положению с учетом дополнительно найденных пиков. С помощью калибровочных пиков, найденных в процедуре *wybor* в ЭПОС I, процедурой *quadd* /86/ производится окончательная энергетическая калибровка с точными значениями положений пиков. Рассмотрение ошибок происходит в процедуре *error* /87/. После того как в этом месте будет введена кривая эффективности детектора, интенсивности пиков могут быть пересчитаны в относительные интенсивности линий. Учитывается не только статистическая ошибка эксперимента, но также и поддающиеся оценке систематические ошибки измерительной аппаратуры, в особенности те, которые вызываются при калибровке по энергиям и интенсивности из-за неточно известных калибровочных кривых /оценка ошибок калибровки по энергиям производится в процедуре *quadd* /. Процедура *result* /88/ подготавливает вывод окончательных результатов и организацию их печати в табличной форме.

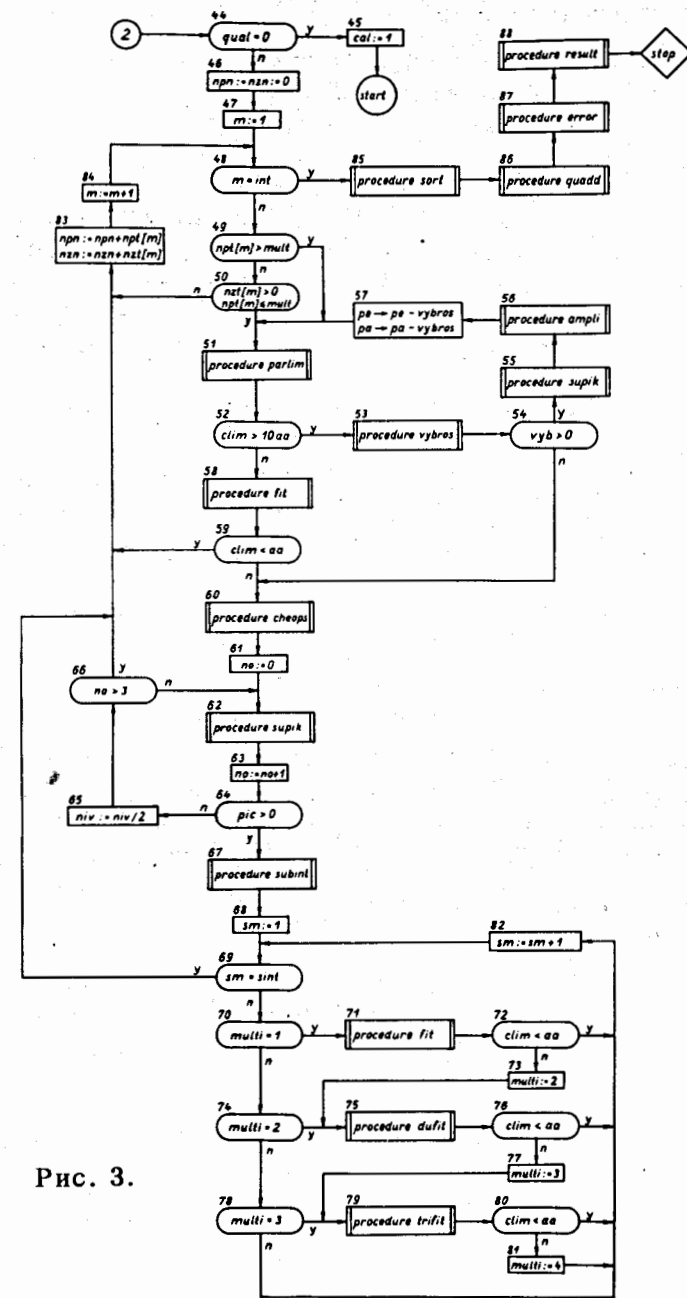


Рис. 3.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При создании ЭПОС² главная задача заключалась в повышении скорости обработки, которая наряду с повышением скорости счета включает автоматическую обработку экспериментальных результатов.

Программа построена по блочному принципу. Внешний блок служит для организации работы программы. Вычислительные операции, по возможности, проводятся в процедурах. При подобной структуре возможно использование малых и средних вычислительных машин, т.к. большая часть программы находится в периферийной памяти. В оперативную память процедуры вызываются последовательно, по мере надобности.

Программа написана на языке АЛГОЛ-60, отлажена и испытана на БЭСМ-4. В настоящее время она переводится на ФОРТРАН для БЭСМ-6. Первая часть программы написана также в кодах машины "Минск-2" / "Минск-22" / и подготавливается на языке ФОРТРАН для машины *Hewlett Packard 2116 B*.

Литература

1. Г.Элер. ОИЯИ, 11-6816, Дубна, 1972.
2. Г.Элер, П.М.Гопыч, Г.В.Винель, В.Хабенихт, Л.А.Вылова. ОИЯИ, 10-6818, Дубна, 1972.
Г.Элер, П.М.Гопыч, Г.В.Винель, В.Хабенихт, Л.А.Вылова. ОИЯИ, 10-6819, Дубна, 1972.
3. M.A.Mariscotti. Nucl. Instr. and Meth., 50, 309 (1967).
4. J.R.Routti, S.G.Prussin. Nucl. Instr. and Meth., 72, 125 (1969).
5. Л.М.Сороко. ОИЯИ, 1-5030, Дубна, 1970..

Рукопись поступила в издательский отдел
28 ноября 1972 года.