

Ц 8408

29/1-73

Э-458

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

460/2-73

P10 - 6818



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

ЭКСПРЕСС-ПРОГРАММА
ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ ЭПОС.
ОПИСАНИЕ ПРОЦЕДУР
КОНСТРУКЦИИ СПЕКТРОВ, ПОИСКА ПИКОВ,
ДЕЛЕНИЯ СПЕКТРА НА ИНТЕРВАЛЫ,
ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ФОНА

ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ

1972

P10 - 6818

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

ЭКСПРЕСС-ПРОГРАММА
ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ ЭПОС.
ОПИСАНИЕ ПРОЦЕДУР
КОНСТРУКЦИИ СПЕКТРОВ, ПОИСКА ПИКОВ,
ДЕЛЕНИЯ СПЕКТРА НА ИНТЕРВАЛЫ,
ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ФОНА

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

В сообщении кратко описаны назначение и принципы работы четырех процедур, входящих в первую часть экспресс-программы обработки спектров (ЭПОС-1). Общее описание ЭПОС содержится в /1/. Процедуры написаны на языке АЛГОЛ-60 для БЭСМ-4. Имеется вариант в машинном коде МИНСК-2 (МИНСК-22) и фортранные варианты для БЭСМ-6 и Hewlett Packard 2116В.

Процедура spekt предназначена для генерации искусственных спектров в виде:

$$eks = f_{0n} + \sum_{j=1}^{pik} f_{[j]} \quad j = 1 \dots pik, \quad (I)$$

где f_{0n} - полином третьей степени, описывающий фон, $f_{[j]}$ - функции, описывающие форму пика, pik - число пиков в спектре. Предполагаемая форма пика - симметричный гауссиан:

$$f_{[j]} = pa_{[j]} * \exp(-2.7725887 * ((k - pe_{[j]}) / b_{[j]})^2),$$

где k - номер канала, $pa_{[j]}$ - амплитуда, $pe_{[j]}$ - положение, $b_{[j]} = \sqrt{b_0 + b_1 * pe_{[j]}}$ - полуширина j -го пика.

Для получения спектров со статистикой в каждом канале находим статистический фактор

$$sta = z * st * \sqrt{eks}, \quad (II)$$

где z - квазислучайное число, st - параметр статистики.

st прибавляется к значению eks , вычисленному по формуле (I). При $st=0$ получаем спектр без статистики, при $st=1$ - квазиэкспериментальный спектр.

Для получения квазислучайных чисел используется видоизмененный алгоритм из [2]. Они распределены по нормальному закону с дисперсией ноль и среднеквадратичным отклонением единица. Гистограмма такого распределения приведена на рис.3.

Параметры фона и всех пиков, параметры зависимости полуширины от номера канала задаются при конструкции, и поэтому точно известны. Такие сконструированные спектры со статистикой и без нее использовались для исследования вычислительных закономерностей при отладке большинства процедур. Обычно спектры со статистикой сконструировались при $st=1.2$. В окончательном варианте программы сконструированные спектры используются для контроля правильности работы отдельных процедур и системы в целом.

Блок-схема $spekt$ приведена на рис. 1а. (1) вводит и печатает исходные данные для конструкции. В цикле по номеру канала k от $k=1$ до kk , где kk - число каналов в сконструированном спектре, вычисляются первый (4) и второй (5) члены в (I) и их сумма (6). Если $st=0$, переходим на конец процедуры, если $st>0$, имеющийся спектр преобразуется в спектр со статистикой. Для канала номер k вычисляем квазислучайное число (11), по (II) находим stq (12) и в (13) формируем результат.

Процедура $supik$ (блок-схема на рис.1б) в спектре от канала k_1 до канала k_2 находит положения максимумов пиков и положения долин. Поиск ведется шагами длиной по $2*ib$ каналов,

* Арабские цифры в скобках обозначают номер блока на соответствующей блок-схеме, римские цифры указывают номер формул из текста.

ib — четное число, близкое к ожидаемому среднему значению по-
луширины пика для данного спектра.

Для каждого канала, входящего в участок длиной ib (первый
участок первого шага показан на рис. 4 верхней штриховкой), вы-

числяется дискретный аналог производной — функция m_f :

$$m_f = (eks_2 - eks_1) / (\sqrt{eks_2} + \sqrt{eks_1}),$$

где eks_2 и eks_1 — значения eks в соседних каналах. Среднее зна-
чение m_f по этим ib каналам заносится в первый элемент мас-
сива $me [1:4]$. Затем заштрихованный участок сдвигается на
 $entier(ib/4)$ каналов вправо и аналогично находится 2, 3 и 4-й
элементы массива me для первого шага (3). Если me проходит
через ноль, то исследуем ее на наличие пика или долины.

Если $me[2] > 0 \wedge me[3] < 0$ (6), то вычисляются заштри-
хованные на рис. 4 площади ad и ae (7). Если $ad > niv \vee ae < -niv$
(8), то считаем, что рядом с каналом $k-ib$ находится пик
(niv задает порог чувствительности к нахождению слабых
пиков). Количество найденных пиков запоминается переменной pk ,
а их положения в массиве — pe (9).

Для более точного определения нуля функции me , через че-
тыре ее значения проводим полином третьей степени. Так находим
поправку xq (10) к целочисленному значению положения пика
 pk (9), учитывается она в (11).

Если (6) не выполняется, то проверяются условия
 $me[2] < 0 \wedge me[3] > 0$ (12) и $a[-niv \vee ak > niv]$ (14). Площади af и ak (13)
заштрихованы на рисунке.

При выполнении этих условий число найденных долин tal
увеличивается на единицу, а элемент массива $nt [tal]$ получает

значение $k-ib$ (15). Поправка к положению доли не вычисляется, т.к. нужны только их целочисленные значения (в $intval$).

Переходим ко второму шагу. Для него вычисляется только $me^{(k)}$ (соответствующий $me^{[k]}$ участок усреднения для второго шага показан нижней штриховкой). Остальные элементы получают новые значения путем пересылки (16) (то же относится к массиву $m_{[1:ib]}$).

Процедура $intval$ (рис.2а) находит среднюю для спектра полуширину пиков b и делит его для удобства дальнейшей обработки на интервалы.

В (2) массив доли упорядочивается так, чтобы каждый пик имел справа и слева от себя по одной долине. Если между двумя пиками долина не найдена, она добавляется посередине между ними, если есть больше одной долины, то все, кроме первой слева, отбрасывается.

Для i -го пика определяется (5) полуширина $bs[i]$ по нескольким точкам на его склонах:

$$bs[i] = |k-pe[i]| * \sqrt{\ln(pa[i]/(eks[k]-fon)) / 2.7725887},$$
где k - номер канала точки на склоне, fon - фон в k -м канале. Фон аппроксимируется прямой, проходящей через соседние с пиком долины, амплитуда оценивается как $eks[entier(pe[i])] - fon$. Точки, близкие к вершине и к основанию пика, при нахождении $bs[i]$ не учитываются. Если для j -го пика нет ни одной точки, пригодной для определения полуширины, то полагаем $bs[j] = ib$.

В (8) по bs находится средняя полуширина sb и взвешенное среднеквадратичное отклонение s . Если $|sb-bs[i]| > 4.5 * s$, то такое $bs[i]$ отбрасывается. Среднее из оставшихся полуширин есть b (8).

Если расстояние dis (11) между двумя пиками $dis > 6 * b$ (12), то между ними будем проводить границу интервала. Такие случаи находятся в (9) ... (14). Для m -го интервала подсчитывается число пиков в нем $npt[m]$ и находится общее число уже размеченных интервалов (13). Если $dis > 10 * b$, то вводим интервалы, не содержащие пиков (15).

Граница первого интервала $nukt[1]$ находится в (16):

$$nukt[1] = \begin{cases} k_1 & pe[1] - k_1 + 1 \leq 4 * b \\ \text{entier}(pe[1] - 4 * b) + 1 & pe[1] - k_1 + 1 > 4 * b \end{cases}$$

в (17) для m -го интервала:

$$dis > 8 * b \begin{cases} nukt[m+1] = \text{entier}(pe[k_i+1] - 4 * b) \\ kt[m] = nukt[m+1] - nukt[m] + 1 \end{cases}$$

$$dis \leq 8 * b \begin{cases} nukt[m+1] = \text{entier}((pe[k_i] + pe[k_i+1]) / 2) - 1 \\ kt[m] = nukt[m+1] - nukt[m] + 1, \end{cases}$$

где k_i - число пиков, содержащееся во всех предыдущих интервалах, $kt[m]$ - число каналов в m -м интервале.

Для последнего интервала (18) находим:

$$kt[int] = \begin{cases} k_2 - nukt[int] & k_2 - pe[p_{ik}] + 1 \leq 4 * b \\ pe[p_{ik}] + 4 * b - nukt[int] & k_2 - pe[p_{ik}] + 1 > 4 * b. \end{cases}$$

Процедура fono (рис.26) определяет параметры фона.

Найдем опорные точки фонового полинома. Вначале переменные mup и $quaf$ получают значение ноль (2). mup - число опорных точек, в которых фон можно считать достаточно чистым и через которые может проходить фоновый полином, $quaf = 0$, если фоновый полином определен для всего спектра в целом, иначе $quaf = 1$.

Если расстояние dis от k_1 до первого пика $dis > 2.5 * b$, то $min := 1$ и в первые элементы массивов xx и yy заносим соответственно положение и число отсчетов для первой опорной точки. Ее положение полагаем равным $k_1 + \text{entier}(b)$, число отсчетов всегда усредняем по ib соседним каналам (3).

Если расстояние dis (6) между соседними пиками $dis > 3.5 * b$ (7), то считаем, что между ними (посредине) есть точка чистого фона. Ее координаты заносятся в следующие элементы массивов xx, yy (8). Если расстояние от последнего пика до k_2 больше $2.5 * b$, то в массив xx заносится положение последней опорной точки $k_2 - \text{entier}(b)$, а в yy заносится значение eks для нее. Всякий раз, когда найдена новая опорная точка, min увеличивается на единицу.

Если число таких точек $min \leq 12$ (11), фон вычисляется отдельно для каждого интервала в виде прямой, проходящей через начало и конец интервала (21), а $qual$ присваивается значение единица (20).

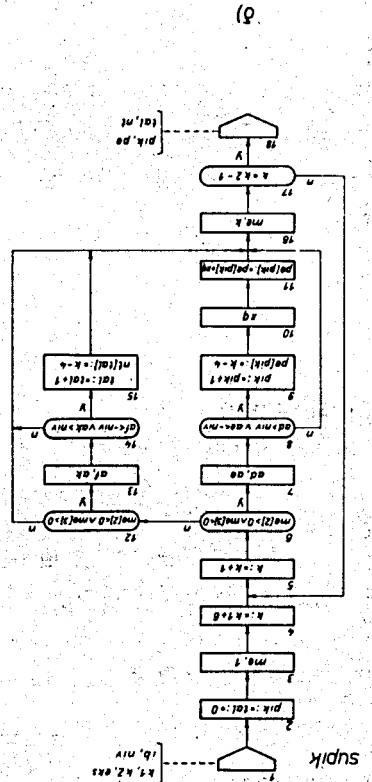
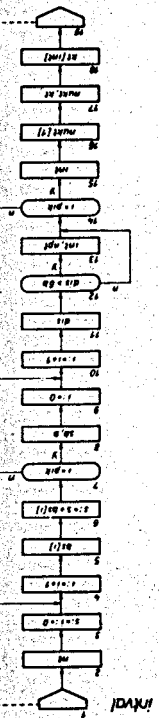
В противном случае, методом наименьших квадратов вычисляются параметры фонового полинома для спектра в целом (14). Если отклонение i -й опорной точки от расчетной кривой больше утроенной статистической ошибки в этой точке, то она отбрасывается. Аналогично проверяются (15) все точки чистого фона. Если число оставшихся после проверки точек n_i меньше числа этих точек до проверки so (16), то $so := n_i$ (18) и в (13) проверяется: $so > 8$ или $so < 8$? Если число оставшихся точек меньше восьми, то через (19) и (20) переходим к (21), работа которого уже описана. Если

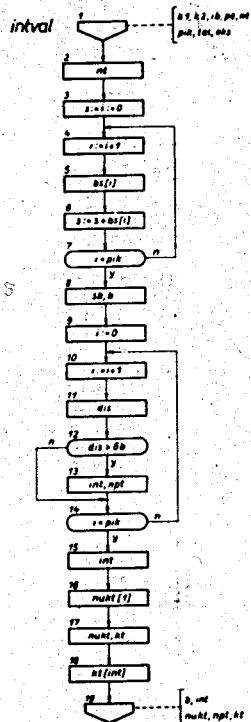
нет - вычисление коэффициентов фонового полинома для всего спектра повторяется (14) при меньшем числе опорных точек, пока изменяется n . Если оно не изменилось, то m получает значение, равное числу оставшихся точек чистого фона, а результирующий массив p_{fop} имеет значения, последний раз вычисленные в (14).

Л и т е р а т у р а

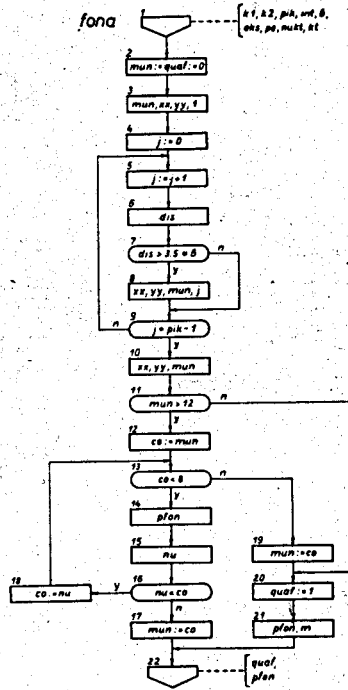
1. Г. Элэр, П.М. Гопыч, Г.В. Винель, В. Хабенихт, Л.А. Вылова. ОИЯИ Р10-6817, Дубна, 1972.
2. P.G. Behrenz. Comm. of the ACM. No 12, 1962.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 ноября 1972 года.





a)



b)

Рис. 2.

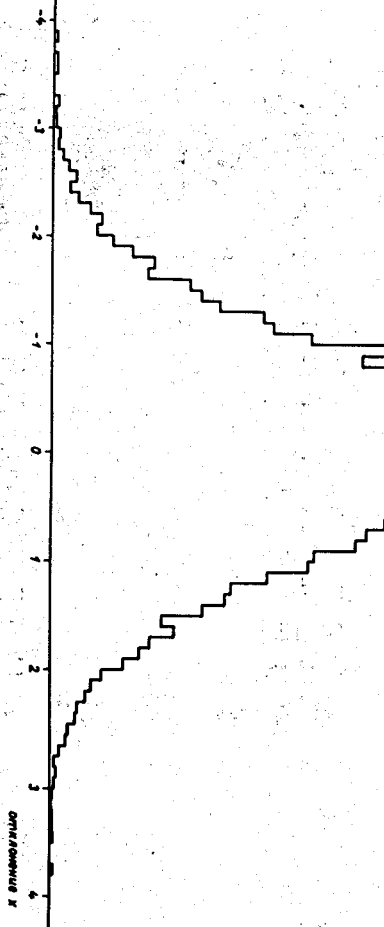
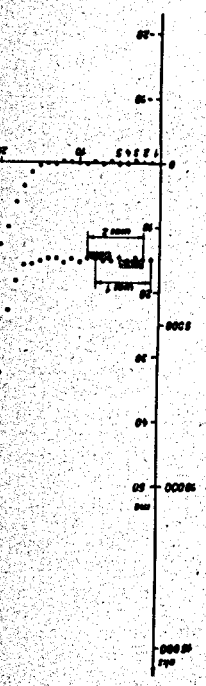


Рис. 3.



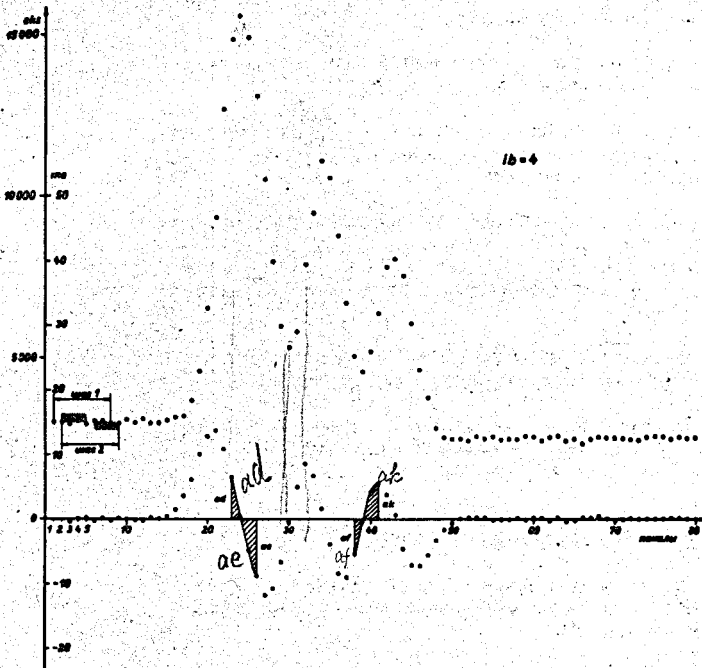


Рис. 4.