

48406
Э-458

29/1-73

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

459/2-73

P10 - 6819



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

ЭКСПРЕСС-ПРОГРАММА
ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ ЭПОС.
ОПИСАНИЕ ПРОЦЕДУР ОПРЕДЕЛЕНИЯ
АМПЛИТУД ПИКОВ, УСТАНОВЛЕНИЯ
АВТОМАТИЧЕСКОГО СООТВЕТСТВИЯ
МЕЖДУ КАЛИБРОВОЧНЫМИ ЭНЕРГИЯМИ
И СПЕКТРОМ, ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ КАЛИБРОВКИ
ПО ЭНЕРГИИ, ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ ОЦЕНКИ
ОШИБОК В ЭНЕРГИИ И ИНТЕНСИВНОСТИ ЛИНИЙ

Лаборатория ядерных промеяи

1972

P10 - 6819

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

ЭКСПРЕСС-ПРОГРАММА
ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ ЭПОС:
ОПИСАНИЕ ПРОЦЕДУР ОПРЕДЕЛЕНИЯ
АМПЛИТУД ПИКОВ, УСТАНОВЛЕНИЯ
АВТОМАТИЧЕСКОГО СООТВЕТСТВИЯ
МЕЖДУ КАЛИБРОВОЧНЫМИ ЭНЕРГИЯМИ
И СПЕКТРОМ, ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ КАЛИБРОВКИ
ПО ЭНЕРГИИ, ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ ОЦЕНКИ
ОШИБОК В ЭНЕРГИИ И ИНТЕНСИВНОСТИ ЛИНИЙ

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

В сообщении завершается краткое описание назначения и принципа работы процедур, входящих в первую часть экспресс-программы обработки спектров (ЭПОС-1). Общее описание ЭПОС содержится в /1/, описание первых четырех процедур ЭПОС-1 можно найти в /2/. Процедуры написаны на языке АЛГОЛ-60 для ЭВМ БЭСМ-4, имеется вариант в машинном коде Минск-2 (Минск-22) и фортранные варианты для БЭСМ-6 и Hewlett Packard 2116B.

Процедура ampri. (рис. I-2) последовательно в каждом интервале вычисляет амплитуды пиков и, если это необходимо, поправки к их положению.

Амплитуду $ra[j]$ j -го пика находим по формуле (I) в (9)^и) или по формуле (II) в (10):

$$ra[j] = \sqrt{n1 * n2} \quad (I)$$

$$ra[j] = \sqrt{n1 * n2 * (1 + 0.63/b^2) * |(1 + b^2 * ((n2 - n1)/n1)^2) / 11.03|} \quad (II)$$

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

n_1 и n_2 значения (eks-join)^(*) в соседних с максимумом пика каналах (7).

Если абсолютное значение нормированной разности n_1 и n_2 $ab = |\ln n_1 - \ln n_2| / (n_1 + n_2)$

больше 0.1 (8), то пользуемся (I) (9), в остальных случаях – (II) (10).

Когда известны амплитуды, можно учесть систематические ошибки в положении сильно перекрывающихся, но разделенных supik (см. работу /2/), пиков. Эти ошибки зависят от отношения амплитуд пиков VV и их взаимного расстояния dis (15). Поправка вычисляется, если $dis < 2.5 * b$ и $VV > 0.001$ (16).

Поправка dea к большему пику и поправка deb к меньшему определяются (17) по формулам:

$$dea = b * \exp(-1.39 + 1.07 * bc + dis^2 * (4.57/b - 1.93 * \sqrt{dis}) + 1.76/b^{3/2}),$$

$$deb = b * \exp(-1.31 - 1.59 * bc + 5.18 * (dis/b)^{3/2} - 1.73 * dis^2 + 4.53/b^2),$$

где $bc = |\ln(VV)|$. Эти поправки учитываются в (18).

Формулы для dea и deb и формула (II) получены опытным путем из анализа результатов подгонки нескольких тысяч пар конструированных пиков.

Процедура Wyboi для автоматической калибровки по энергии находит пики, соответствующие n заданным экспериментатором калибровочным энергиям.

^(*) Список общих обозначений ЭПОС-І приведен на стр. 10

Назовем узлами (рис.2) точки пересечения горизонталей $C1\dots C6$, которые обозначают заданные калибровочные энергии, и вертикаляй, которые обозначают положения пиков. Пики, соответствующие калибровочным энергиям, обозначены $p1\dots p6$.

Алгоритм находит узлы $u1$ и $u2$, которым соответствуют первая и последняя калибровочные энергии. Проведенная через них прямая содержит в своей окрестности между узлами $u1$ и $u2$ еще $n-2$ узла. Окреотность искомой прямой b (полоса шириной $2*de$, где de – максимальная нелинейность аппаратуры) показана двумя тонкими линиями.

Искомая прямая может проходить только между узлами, лежащими на горизонталях $C1$ и $C6$ (им могут соответствовать первая и последняя калибровочные энергии), причем такими, что между ними содержится еще не менее $n-2$ вертикалей. Если в семействе прямых, проходящих через узел ($1, C1$) и все узлы, лежащие справа от узла ($5, C6$) на горизонтали $C6$, нет искомой, то переходим к семейству прямых, проходящих через узел ($2, C1$) и все узлы справа от узла ($6, C6$) на горизонтали $C6$ и т.д., пока искомая прямая не будет найдена.

Чтобы сократить время работы, накладываем естественное, с точки зрения эксперимента, условие: пик, соответствующий последней калибровочной энергии, лежит дальше $dd = 0.75 * re [rik]$.

Работу процедуры регулируют параметры n и de . Ограничение на n ($n \geq 6$) накладывается, чтобы исключить возможные случайные варианты. de зависит от качества измерительного тракта, оно ограничивает выбор калибровочных энергий: соответствующие им линии должны отстоять по энергии не менее чем на de . Это ограничение можно существенно ослабить, анализируя среднеквадратичное отклонение узлов в окрестности искомой прямой.

После присваивания (рио.Л-б) переменной vyb , используемой во внешнем блоке для управления, нулевого значения (2) сравниваются n и pik (3), (5), (8). Если они одинаковы (3), то формируем массивы результатов x (положения калибровочных пиков) и y (калибровочные энергии) и передаем в (23) для проверки. Проверка правильности соответствия между калибровочными энергиями и спектром производится путем сравнения отношений вида:

$$cy = (c2 - c1) / (c6 - c1), \quad cx = (p2 - p1) / (p6 - p1).$$

Если все такие отношения удовлетворяют условию

$$1 - d < cy / cx < 1 + d,$$

где $d = 0.01 + 0.05$ в зависимости от de , то считаем, что соответствие установлено верно.

При положительном исходе проверки переходим на конец процедуры, иначе $vyb = 2$, (24) передает управление (25) и выдается информация об ошибке. Если $pik \neq n$ (5), то в (6) или (7) формируем массивы x , y и переменные $nk = \min(n, pik)$, $pk = \max(n, pik)$. Это обеспечивает возможность работы при $n \geq pik$. Если $n < 6$, то $vyb = 1$ (9); (10) печатает информацию об ошибке, затем переходим на конец процедуры.

Если $n \geq 6$, (11) вычисляет номер ki первого из пиков, лежащего дальше dd . В цикле по номеру узла i на горизонтали $c1$ и во вложенном в него цикле по номеру узла k на горизонтали $C6$ находим коэффициенты прямой, проходящей через узлы i и k (16), и подсчитываем число узлов r в окрестности этой прямой между i -м и k -м узлами (17). Если $r+2 = nk$, то выходим в (23) для проверки сформированного (17) результирующего массива.

Если $pik < n$ (21), в (22) элементы массива x получают значение элементов массива y и наоборот (см. обозначения на блок-схеме).

Ту же задачу, что и $wybor$, может решать процедура $poisk$. Ее алгоритм основан на поиске пиков, соответствующих первым нестабильным калибровочным энергиям путем сравнения отношений типа тех, что использует $wybor$ для проверки результатов.

Процедура quad методом наименьших квадратов вычисляет коэффициенты a_0 , a_1 , a_2 параболы, описывающей зависимость энергии от номера канала. n опорных точек для этого найдены $wybor(poisk)$. Статистический вес i -й опорной точки вычисляем по формуле:

$$q[i] = 1/dy[i] / \sum_j (1/dy[j]) \quad j=1\dots n,$$

где dy - массив ошибок в калибровочных энергиях.

Если число калибровочных точек $n < 6$, то находятся линейные коэффициенты зависимости энергии от номера канала a_0 и a_1 ($a_2 = 0$).

Процедура resum формирует и печатает массивы результатов ВПОС-І: энергии и оценки ошибок в энергии, интенсивности и оценки ошибок в интенсивности для каждой линии.

При оценке ошибок используется функция статистической достоверности в определении положения (I), амплитуды (II) и полуширинны (III) j -го изолированного пика:

$$mfe = (0.001 + (\sqrt{fon} / pa[j] + pa[j]/2)/3) * b, \quad (I)$$

$$mfa = (\sqrt{pa[j]} + \sqrt{fon}/2) / pa[j] + 0.002, \quad (II)$$

$$mb = (1 + (fon / pa[j])^{0.6}) / pa[j]^{0.6} + 0.002, \quad (III)$$

где f_{0m} - значение фона в точке максимума пика. Эти функции получены эмпирически, путем анализа результатов обработки по программе ЭПОС в полном объеме около 20 тысяч изолированных конструктированных пиков. По этим формулам можно найти среднюю ошибку в определении соответствующей величины, которую допускает статистическая природа обрабатываемого спектра при данных параметрах f_{0m} , b , $pa[j]$. Графики этих формул приведены на рис.3. По оси абсцисс отложен фон, слева по оси ординат - амплитуда, справа по оси ординат-шкалы для $mfe = \Delta E/b$, $mfa = \Delta a/a$, $mfb = \Delta b/b$, где E - энергия, a - амплитуда.

Энергии линий вычисляются во внешнем блоке, ошибка в энергии j -й линии оценивается по формуле:

$$den[j] = (a1 + 2 * a2 * pa[j]) * mfe.$$

Для вычисления интенсивности $in[j]$ и оценки ошибки в интенсивности $din[j]$ этой линии используем формулы:

$$in[j] = 1.064 * b * pa[j],$$

$$din[j] = \sqrt{mfa^2 + mfb^2} * 100\%.$$

Перед ЭПОС-І не ставится задача точного вычисления энергий, интенсивностей и полного учета их ошибок. Эти вопросы будут решены при работе ЭПОС в полном объеме /1/.

Экспериментальный спектр (рис.4), имеющий 660 каналов и 33 пика, обрабатывается ЭПОС-І на БЭСМ-4 ~ 10 сек и на Минск-2 ~ 20 сек. Для сравнения этот спектр обработан по программе ГАММА /3/, используемой в ОИЯИ для окончательной обработки гамма-спектров. Нижний ряд стрелок на рисунке - результаты ГАММА, верхний -

- результаты ЭПОС - I. Если оба результата в пределах ошибки совпадают, то стрелка помечена верхним темным кружком (совпадение энергий) или нижним темным кружком (совпадение интенсивностей).

ЭПОС-I пригодна для использования в системе on-line на базе малой или средней ЭВМ для контроля за ходом эксперимента с полным циклом порядка 3-5 минут.

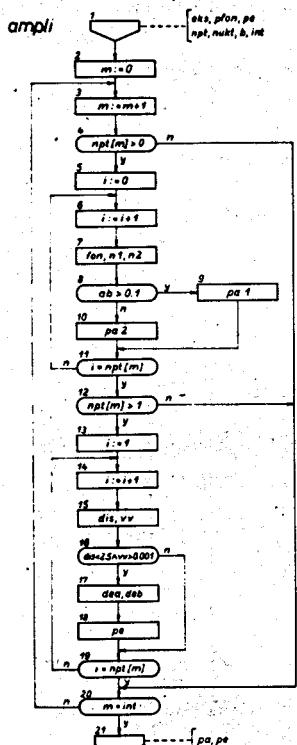
Л и т е р а т у р а

1. Г. Элер, П.М.Гопыч, Г.В. Винель, В. Хабенихт, Л.А.Вылова, ОИЯИ, Р10-68I7, Дубна, 1972.
2. Г. Элер, П.М.Гопыч, Г.В. Винель, В.Хабенихт, Л.А.Вылова, ОИЯИ, Р10-68I8, Дубна, 1972.
3. G. Winter. ZfK-182, Mai 1969.

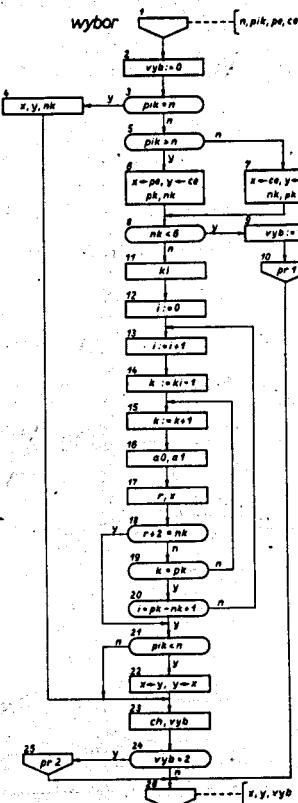
Рукопись поступила в издательский отдел
28 ноября 1972 года.

СИМВОЛЫ ОБЫЧНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

a_0, a_1, a_2	- коэффициенты параболы, описывающей зависимость энергии от номера канала
b	- средняя для спектра полуширинка пика
b_0, b_1	- коэффициенты зависимости полуширинны от номера канала
$ce[1:n]$	- массив калибровочных энергий
$den[1:pik]$	- ошибки в энергиях линий
$din[1:pik]$	- ошибки в интенсивности линий
$eks[1:kk]$	- спектр, экспериментальные значения
$en[1:pik]$	- энергии линий
int	- число интервалов в спектре
$in[1:pik]$	- интенсивности пиков
kk	- число каналов в спектре
k_1, k_2	- границы обрабатываемого участка спектра
$kt[1:int]$	- число каналов в каждом интервале
mun	- число опорных точек фонового полинома
n	- число калибровочных энергий
$npt[1:int]$	- число пиков в каждом интервале
$nt[1:tal]$	- положения долин
$nukt[1:int]$	- начальный номер канала каждого интервала
$ra[1:pik]$	- амплитуды пиков
$re[1:pik]$	- положения пиков
$pfon[1:4,1:int]$	- параметры фона
pik	- количество пиков в спектре
$p0$	- массив исходных данных для конструции
$quaf$	- 0, если фоновый полином проведен для спектра в целом 1, если фон определен отдельно для каждого интервала
st	- параметр статистики
tal	- число долин в спектре



a)



δ)

Рис. I.

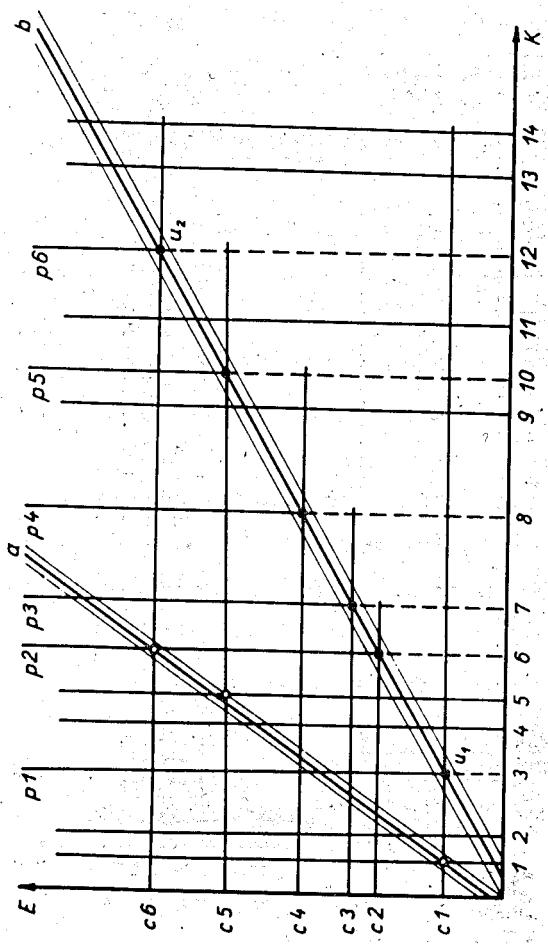


Рис. 2.

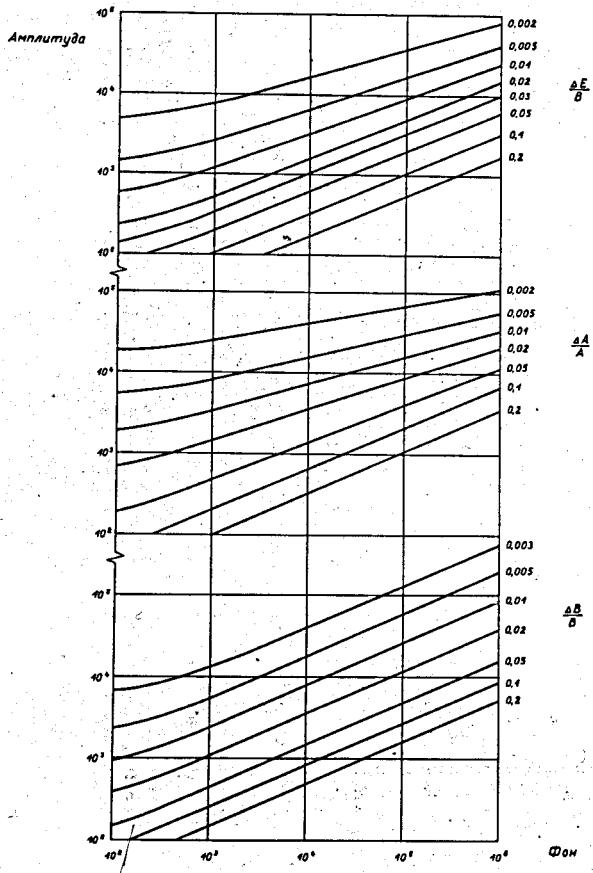


Рис. 3.

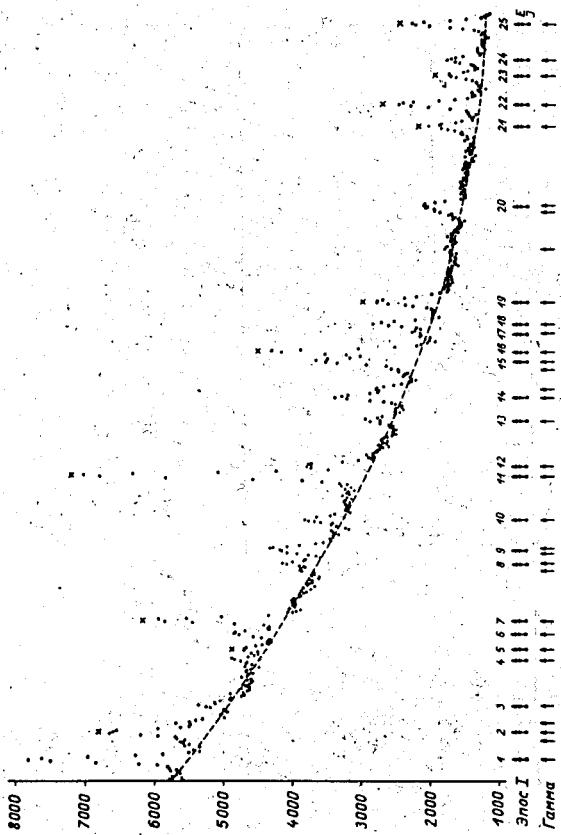


Рис. 4.