

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



7364

Сл. кит. зал.

P10 - 7364

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

ЭКСПРЕСС-ПРОГРАММА
ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ ЭПОС

Определение зависимости
разрешающей способности детектора
от энергии

1973

ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ

P10 - 7364

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

**ЭКСПРЕСС-ПРОГРАММА
ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ ЭПОС**

Определение зависимости
разрешающей способности детектора
от энергии

* Харьковский государственный университет

**Научно-техническая
библиотека
ОИЯИ**

1. Введение.

При определении порядка мультиплетности групп сильно перекрывающихся пиков спектра, а также для достижения необходимой точности при вычислении энергий и интенсивностей, должно уделяться большое внимание точному определению полуширин пиков для обрабатываемого участка спектра. Достижению максимально возможной точности в вычислении полуширин, соответствующей точности экспериментальных данных, в программе ЭПОС уделяется большое внимание. Во второй части программы (ЭПОС-II) при обработке интервалов спектра, содержащих малое число (один или два) хорошо изолированных пиков, полуширина наряду с положением и амплитудой является свободным параметром подгонки и определяется с высокой точностью $1/\lambda$. При достаточном числе таких одиночных пиков в спектре появляется возможность нахождения аналитической зависимости полуширины от номера канала $b(k)$. Эту задачу решает процедура *quabe*, после чего при обработке более сложных участков спектра в ЭПОС-III полуширина не является свободным параметром, и при подгонке используется ее теоретическое значение.

Структура *quabe*, а также структура ЭПОС-II, в которую она включена, подчинена цели получить всю информацию, необходимую для определения $b(k)$ из измеренного спектра. И только в случае сложных спектров, с малым числом хорошо изолированных пиков, программа требует от экспериментатора для нахождения функции $b(k)$ ввода калибровочного спектра.

2. Влияние ошибок в полуширине на точность результатов обработки спектра.

От точности, с которой будет получена аналитическая зависимость $b(k)$ в квабе зависит успешная дальнейшая обработка спектра, в особенности участков с сильно перекрывающимися пиками. Укажем два фактора, на которые ошибка в полуширине влияет наиболее сильно:

1. При решении задачи автоматической обработки спектров возникает проблема автоматического определения порядка мультиплетности таких его участков, где есть два или более сильно перекрывающихся пиков. Возможность решения этой проблемы зависит от нескольких обстоятельств, в том числе имеется сильная зависимость от точности, с которой известна полуширина пиков, образующих мультиплет. Эта точность непосредственно влияет на степень достоверности определения порядка мультиплетности.

2. Для одиночных изолированных пиков ошибка в полуширине на точность определения положения и амплитуды влияет незначительно, а соответствующую ошибку, вносимую в площадь пика, нетрудно оценить. В случае же сильно перекрывающихся пиков, образующих мультиплет, ошибка в полуширине влияет на точность результатов подгонки гораздо сильнее, причем существенные ошибки вносятся в значения всех параметров этого мультиплета (положений и амплитуд образующих его пиков). Эту зависимость мы покажем на примере мультиплета самого низкого порядка - дублета.

На рис. 1 и 2 приведен конкретный вид зависимости систематического отклонения параметров дублета от их истинных значений как функция ошибки в полуширине ($\Delta b/b$ взято в диапазоне от -15% до +10%, b - полуширина). Эти зависимости были получены в результате подгонки по программе ЭПОС конструированных спектров, содержащих

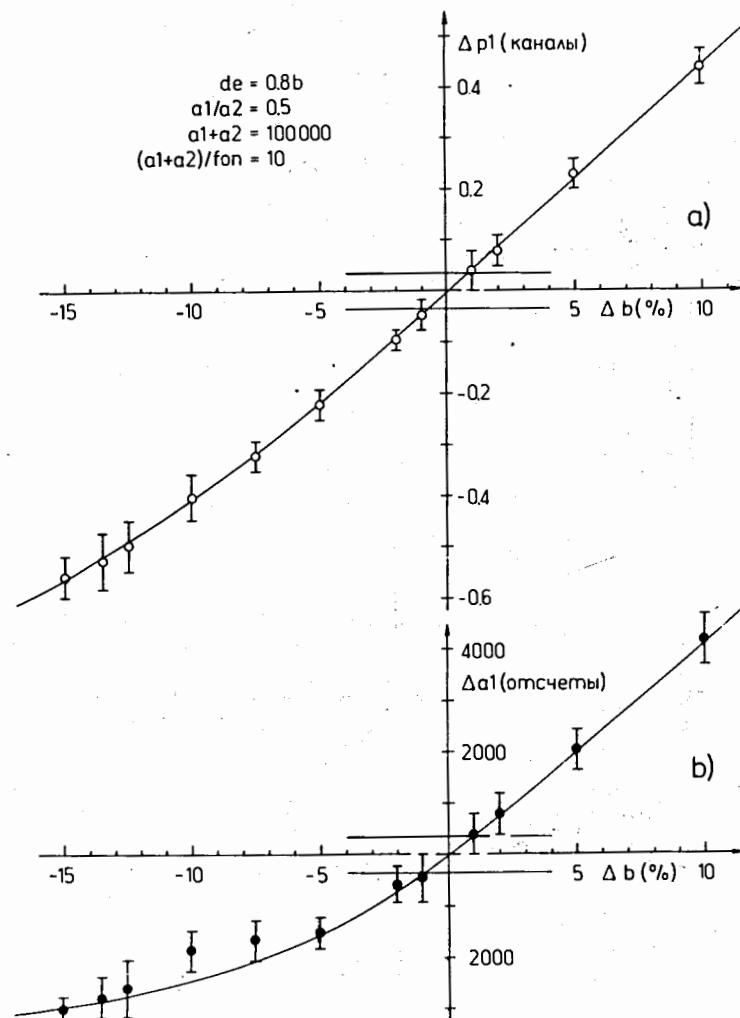


Рис. 1.

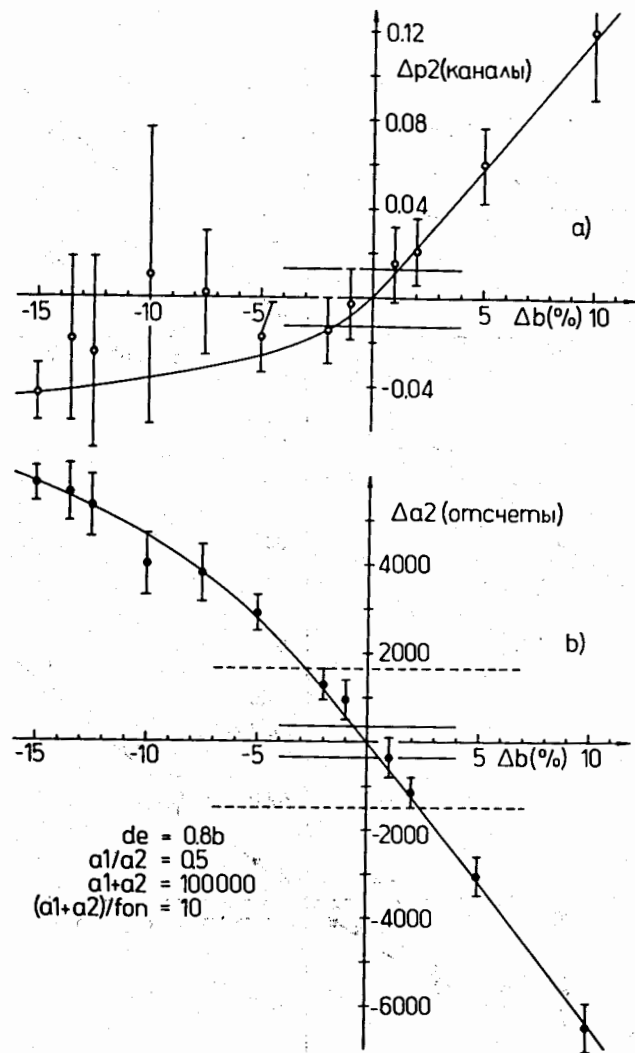


Рис. 2.

дублет. Параметры дублета задавались при конструкции и поэтому точно известны, они приведены на рисунках (описание подпрограммы для конструкции содержится в /2/). Конструкция проводилась с различными статистиками, но всегда при одном и том же "истинном" значении полуширины. Полуширина при подгонке отличалась от истинной на величину Δb . Например, из рис. 2 видно, что если полуширина будет отличаться от истинной всего на 2%, то для амплитуды большего пика, входящего в дублет, ошибка увеличивается примерно в четыре раза (области между пунктирными линиями на рисунке) по сравнению с той ошибкой, которую допускает статистическая природа спектра (область этой ошибки для истинной полуширины заключена между сплошными линиями).

Такая сильная зависимость точности определения параметров мультиплета от точности в значении полуширины пиков, образующих этот мультиплет, требует нахождения коэффициентов зависимости $b(k)$ с максимально возможной точностью и аккуратного вычисления ошибок этой зависимости. Из рисунков 1 и 2 видно, что даже самое незначительное отклонение значения полуширины, используемого при подгонке, от истинного его значения ухудшает точность в определении всех параметров. Полный учет влияния ошибок в полуширине на точность нахождения параметров спектра будет производиться в процедуре *error*^{4/} с учетом формул, описывающих зависимости типа тех, что приведены на рис. 1 и 2.

3. Определение зависимости $b(k)$, (процедура *quabe*).

После обработки в ЭЛОС-II всех интервалов спектра, содержащих один пик, при условии, что число подогнанных пиков оказалось не меньше десяти, начинает работу процедура *quabe*, в которой из найденных точных значений полуширины по методу наименьших квадратов отыскивается зависимость полуширины от номера канала. Если число подо-

гнанных пиков оказалось недостаточным (меньше 10), то обрабатываются все интервалы спектра, содержащие два хорошо изолированных пика (расстояние между ними больше $2b$, где b – средняя для спектра полуширина, найденная в процедуре *intval* ^{1/2}). Если и после этого число хорошо подогнанных пиков окажется недостаточным, то в процедуре *quave* делается попытка дополнительно к уже обработанным найти хорошо изолированные пики в нерассмотренных до сих пор интервалах с числом пиков больше двух. Для этих пиков проводится приближенное вычисление полуширины по нескольким точкам на склонах, так, как это делалось в *intval*, после чего они включаются в список пиков для определения зависимости $b(k)$. При вычислении $b(k)$ каждой точке присваивался вес

$$q_i = (1/a_i^2) / \sum_{i=1}^{num} (1/a_i^2), \quad (I)$$

где q_i – вес i -ой точки, num – число точек (полуширин), используемых для нахождения искомой зависимости, a_i – величина ошибки, с которой найдена i -ая полуширина. Точность, с которой возможно определение полуширины при подгонке, определяется статистической природой спектра, и ошибка a_i задает границы физически достоверного результата. Для пика, имеющего амплитуду a_i на фоне f_{on} и полуширину b , она может быть вычислена по формуле

$$a_i = (0.002 + (1 + (f_{on}/a_i)^{0.6})/a_i^{0.6}) \cdot b, \quad (II)$$

полученной эмпирически в результате обработки по программе ЭПОС около 20 000 одиночных конструированных пиков ^{1/3}.

Зависимость полуширины от номера канала отыскивается в виде

$$b(k) = \sqrt{bb1 + bb2 \cdot k} \pm db(k) \quad (III)$$

$$db(k) = \sqrt{(db2 + (k - ks)^2 \cdot db1) / b(k)} / 2, \quad (IV)$$

где $bb1$ и $bb2$ – коэффициенты функции $b(k)$, k – номер канала, ks – сумма всех $q_i \cdot x_i$, т.е. среднее всех x_i положений тех пиков, полуширины которых использовались при нахождении $b(k)$, $db1$ и $db2$ – коэффициенты, с помощью которых в любом месте спектра может быть вычислена ошибка полученной теоретической кривой. Вычисление ошибки $db(k)$ – стандартное для метода наименьших квадратов.

На рис. 3 представлена блок-схема процедуры *quave*. В блоке (2) величине *reso* присваивается значение единица, что будет являться при дальнейшей работе программы показателем точного определения коэффициентов $bb1$ и $bb2$. Если это окажется невозможным, то значение *reso* будет изменено. Величина *num* считает число пиков, полуширины которых будут взяты для определения $b(k)$, и вначале *num*=0 (3). Начиная с блока (4), до (12) формируются массивы положений этих пиков x и их полуширин y , а также массив соответствующих этим полуширинам ошибок d , вычисленных по формуле (II). В каждом из интервалов спектра с номером m ($m=1 \dots int$) просматриваются все *npt* пиков, лежащие в этом интервале ($l=1 \dots npt$). Условие (6) будет выполняться только для хорошо подогнанных пиков, т.к. отрицательный знак в значении положения пика в массиве *pe* является в ЭПОС-II признаком того, что данный пик обработан, и в массив *pe* на место найденного при предварительной обработке положения пика занесен результат подгонки. Поэтому после (6) для всех хорошо подогнанных пиков совершается переход к (10), где *num* увеличивается на единицу, а положение этого пика, его полуширина и ошибка в полуширине заносятся в соответствующие *num* элементы массивов x, y, d . Работой блоков (8) и (9) управляет величина *mult*, которая во внешнем блоке ЭПОС-II задает число пиков на интервалах, выбираемых для обработки. Эти блоки работают только при *mult* > 2 (7), т.е. когда после обработки всех

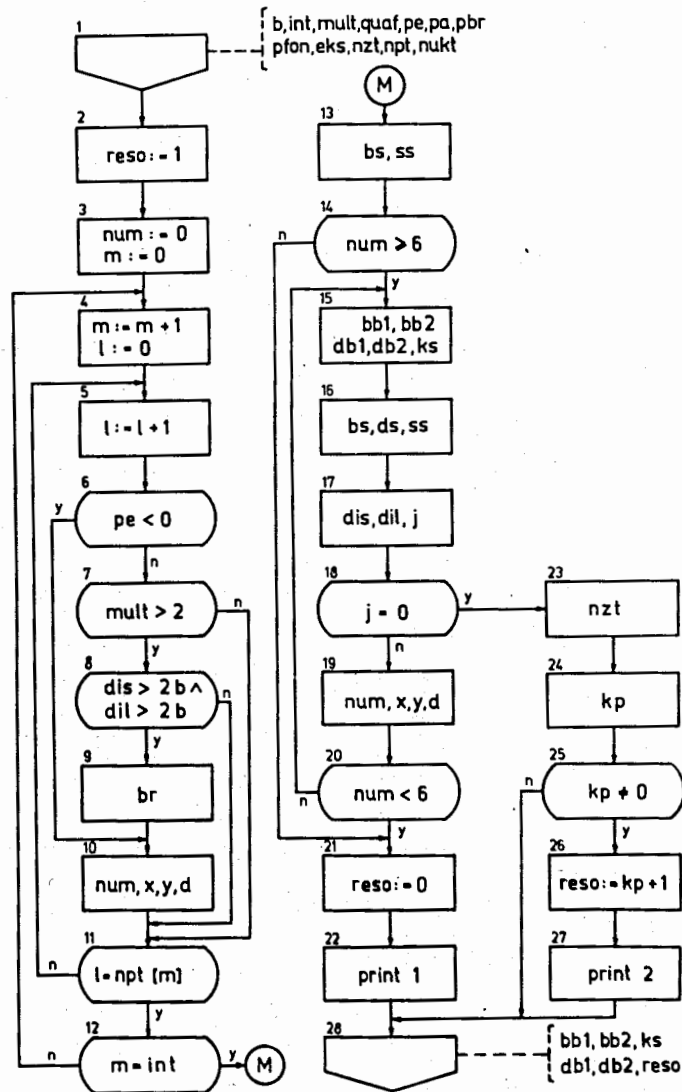


Рис. 3.

интервалов с одним пиком ($mult=1$) и всех интервалов с двумя изолированными пиками ($mult=2$) число хорошо подогнанных пиков оказалось меньше десяти, и необходимо найти дополнительные пики в спектре для определения $b(k)$. В этом случае для очередного пика l из интервала m проверяется условие достаточной изолированности пика (8), которое требует, чтобы расстояние до соседнего пика слева (dis) и справа (dil) было больше $2b$. В случае выполнения (8) для пика вычисляется приближенное значение полуширины $br(9)$. После увеличения num на единицу в (10) это значение полуширины заносится в массив y , а в массив x заносится приближенное положение этого пика из массива pe . По окончании работы блоков (4) - (12) массивы x, y, d сформированы.

Для возможно более точного определения зависимости $b(k)$ необходимо еще до вычисления коэффициентов $bb1$ и $bb2$ из всех полуширин массива y исключить сильно отклоняющиеся от среднего значения. Завышенные значения полуширин, даже после хорошо прошедшей подгонки интервала могут появиться, например, для тех пиков, которые в программе интерпретировались как одиночные, хотя на самом деле являются группой сильно перекрывающихся пиков с расстоянием между ними меньше b и не могут быть разделены процедурой поиска пиков [2]. Вероятность как завышенных, так и заниженных полуширин в массиве y еще больше, когда вследствие $mult > 2$, полуширины некоторых точек массива вычислялись приближенно. Для исключения таких экстремальных полуширин в (13) вычисляются средняя полуширина точек массива y и средневзвешенное среднеквадратичное отклонение ss . Те точки, значения полуширин которых отличаются от средней более, чем на $1.5 \cdot ss$, исключаются из массивов x, y, d . Если теперь окажется $num < 6$ (14), то $reso$ получает значение ноль (21), и работает индикационная печать (22), предупреждающая экспериментатора о недостаточности

информации в спектре для нахождения зависимости $b(k)$ (требуется ввод коэффициентов bb_1 и bb_2 , которые могут быть получены при обработке калибровочного спектра).

При $num > 6$ в (15) по методу наименьших квадратов через num точек, заданных массивами x, y , проводится искомая кривая, т.е. вычисляются $bb_1, bb_2, db_1, db_2, ks$. Для проверки точности найденной зависимости $b(k)$ в (16) для каждой i -ой точки массива x вычисляется теоретическое значение полуширины bs и ошибка в теоретической полуширине ds (формулы III и IV). Затем находится отклонение ss теоретической полуширины от соответствующей ей полуширины массива y . Допустимым пределом отклонения i -ой точки от полученной кривой считаем утроенную сумму двух ошибок: ошибки теоретической (ds) и ошибки, связанной с физической достоверностью (соответствующий элемент массива d). Если для какой-нибудь точки отклонение ss превышает допустимый предел, то такая точка плохо ложится на теоретическую кривую и должна быть исключена из массивов x, y, d , после чего процесс нахождения $b(k)$ необходимо повторить. Чтобы оптимальным образом провести кривую, одновременно исключаются не более двух точек, причем ошибки в них должны быть разных знаков. Для этого анализируются максимальное отклонение вниз от кривой dls и максимальное отклонение вверх dif (17). Затем проверяется условие (18), выполнение которого ($j=0$) означает, что все точки хорошо ложатся на кривую. Если же dls или dif (а возможно, и оба вместе) превышают предел допустимого отклонения, то величина j оказывается равной единице (или двум). Тогда в (19) num уменьшается на j единиц, а из массивов x, y, d исключаются элементы, соответствующие этим точкам. В (20) опять проверяется условие $num > 6$, и если оно выполняется, управление передается блоку (15), где процесс определения зависимости $b(k)$ повторяется. Так происходит до тех пор, пока либо выполняется (18), либо опреде-

ление $b(k)$ оказывается невозможным ($num < 6$), и работают блоки (20), (21), как это описано выше. После выполнения (18) зависимость $b(k)$ считаем найденной с возможной для измеренного спектра точностью. В (23) среди уже обработанных пиков помечаются те, которые плохо ложались на теоретическую кривую (соответствующие полуширины были отброшены при нахождении $b(k)$). Для интервалов, в которых лежат такие пики, изменяется соответствующим образом величина nzt этого интервала с тем, чтобы в дальнейшем их обработку повторить еще раз. В блоках (24) - (27) проверяется, достаточна ли точность найденной теоретической кривой, чтобы с ее помощью вычислять полуширину в любом месте спектра. Если для рассматриваемого пика ошибка в теоретической полуширине (формула IV) не превышает ошибки, связанной с физической достоверностью (формула II), то считаем точность, с которой задает полуширину аналитическая зависимость $b(k)$, удовлетворительной в данном месте спектра. Это условие проверяется для всех еще не обработанных пиков и, если оно выполняется по всему спектру, то в (24) число пиков kr , для которых полуширина известна плохо, равно нулю. В противном случае $reso$ присваивается значение $kr + 1$ (26), и работает индикационная печать, предупреждающая, что зависимость $b(k)$ желательно определить более точно.

На примере двух конструированных спектров из рис. 4 и 5 поясняется работа процедуры *quab*. На обоих рисунках схематично представлены те одиночные пики спектра, которые после их подгонки были использованы для определения зависимости $b(k)$. Нераспознанные дублеты, подгонявшиеся как одиночные пики, отмечены внизу двумя стрелками. При конструкции в обоих случаях полуширина задавалась коэффициентами $bb_1=20$ и $bb_2=0.003$. Полученные в *quab* коэффициенты приведены на рисунках справа. В первом случае (рис.4) выбран спектр, со-

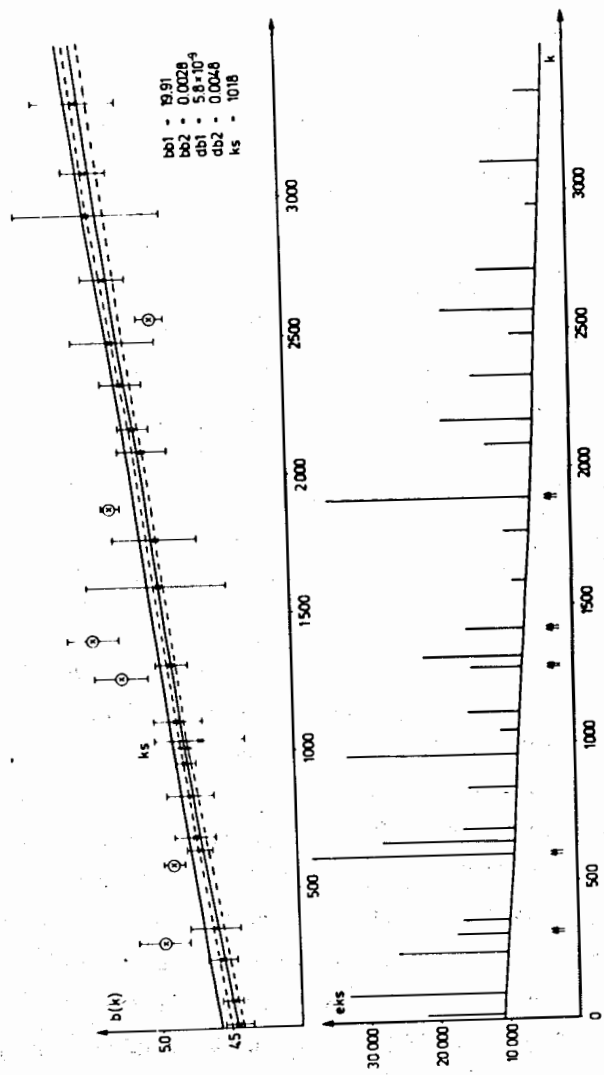


Рис. 4

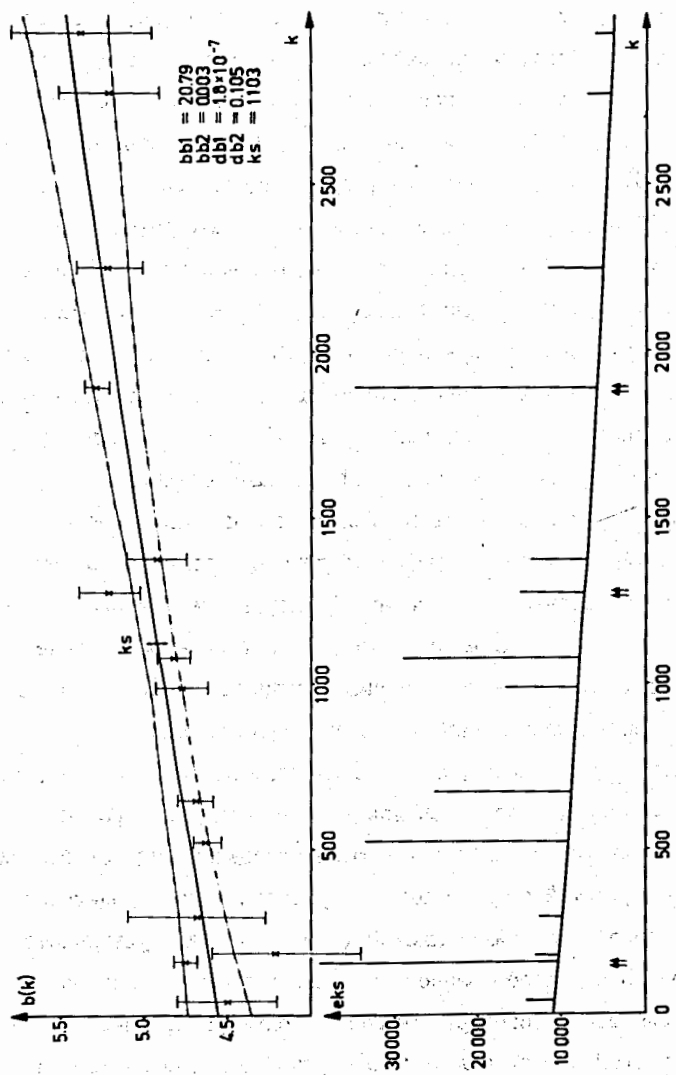


Рис. 5

держаний большое число одиночных пиков с хорошей статистикой по всему спектру. В верхней части рисунка крестиками отмечены соответствующие этим пикам значения полуширин и показаны пределы точности, с которой эти полуширины найдены (между двумя штрихами заключена область, равная утроенной ошибке Δ_1). Кружками отмечены те точки, которые были отброшены при нахождении $b(k)$. Соответствующие им пики, среди которых пять дублетов, будут подгоняться еще раз, и значение полуширины для них будет вычислено из полученной функции. На рисунке приведены только первая и окончательная кривые (жирные линии). Окончательная кривая получена с хорошей точностью, область ошибки для нее (утроенная теоретическая ошибка Δ_2) заключена между двумя пунктирными линиями. Эта ошибка удовлетворяет требованию точности в определении полуширины, т.к. по всему спектру она не превышает ошибок, связанных со статистической природой спектра. И, следовательно, теоретические значения полуширин при подгонке еще не обработанных участков спектра будут определены с точностью не хуже, чем точность экспериментальных данных. В результате для сложных участков этого спектра становится возможным надежное разделение мультиплетов, а также сведение к минимуму влияния ошибки в полуширине на определение для них параметров положения и амплитуды. Часто, для встречающихся на практике спектров, ряд интенсивных, достаточно изолированных пиков расположен в его начале. Середина и конец спектра, хотя и содержат большую информацию в виде слабых линий, но не имеют в этой области пиков, пригодных для определения $b(k)$. Поэтому обработка этих областей (в особенности мультиплетов) может быть просто нецелесообразной. На рис. 5 приведен пример определения $b(k)$ для такого спектра. Ошибка в полуширине, вычисленной с помощью этой кривой, очень большая, особенно по краям спектра, и не может удовлетворить поставленным требованиям точности (не превышать

ошибок, связанных со статистической природой спектра). Кривая проведена только один раз, дублеты не отброшены. Хотя число участвующих в определении $b(k)$ пиков кажется достаточным, сосредоточены они в основном в начальной области спектра (первая треть). В середине и конце спектра из пяти интенсивных пиков, входящих в определение $b(k)$ с большим весом, два дублета. Конец спектра представлен только двумя слабыми пиками, вес которых очень мал, и поэтому они практически не влияют на ход кривой. Как видно из рисунка, для первого и последнего дублета ошибка в теоретическом значении полуширины более чем в два раза превышает ошибку, связанную со статистикой. То же самое можно сказать и о пятой довольно интенсивной линии спектра. Дальнейшая обработка спектра с полученной зависимостью $b(k)$ нежелательна, в особенности для групп сильно перекрывающихся пиков. С ее помощью невозможно надежное определение порядка мультиплетности группы, а также определение параметров пиков, с точностью, которую позволяют экспериментальные данные. Ошибка в определении всех параметров, как это следует из рис. 1 и 2, сильно возрастет по сравнению с той, которая связана со статистической природой спектра. В данном случае экспериментатор будет информирован о нецелесообразности дальнейшей обработки, на печать будет выдано значение $res = k\rho + 1$, где $k\rho$ - число пиков, для которых подгонка с полученной $b(k)$ нежелательна.

4. Заключение.

На точность вычисления зависимости разрешения детектора от номера канала, а значит, и на точность результатов, оказывает сильное влияние организация внешнего блока программы, в частности, структура ЭПОС-II. Это относится к способу, с помощью которого для определения функции $b(k)$ выбираются, по возможности, действительно одиноч-

ные линии спектра. Например, уже во внешнем блоке сильно перекрывающиеся пики с расстоянием между ними большим, чем 0.3ν , но еще меньшим ν , которые находятся процедурой поиска пиков как одиночные, в силу того, что огибающая кривая для них имеет один максимум, будут распознаны как мультиплеты и, следовательно, не могут быть взяты для определения зависимости $\nu(k)$. С помощью вычисляемой в *quabe* величины *reso*, в ход процесса обработки спектра, не дожидаясь его окончания, можно вносить необходимые коррективы, что, в конечном счете, при правильном организационном построении процессов измерений и обработки, приводит к заметной экономии времени и к повышению точности и физической достоверности результатов.

Благодаря автоматическому характеру обработки и высокой скорости работы программы становится возможным, с ее помощью в *on-line* режиме легко осуществлять контроль за измерениями, требующими длительного времени, вычисляя через определенные его промежутки зависимость разрешающей способности детектора от энергии.

ЛИТЕРАТУРА.

1. Г.Элер, П.М.Гопич, Г.В.Винель, В.Хабенихт, Л.А.Вилова. ОИЯИ, Р10-7366, Дубна, 1973.
2. Г.Элер, П.М.Гопич, Г.В.Винель, В.Хабенихт, Л.А.Вилова. ОИЯИ, Р10-6818, Дубна, 1972.
3. Г.Элер, П.М.Гопич, Г.В.Винель, В.Хабенихт, Л.А.Вилова. ОИЯИ, Р10-6819, Дубна, 1972.
4. Г.Элер, П.М.Гопич, Г.В.Винель, В.Хабенихт, Л.А.Вилова. ОИЯИ, Р10-6817, Дубна, 1972.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 июля 1973 года.