

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



7365

Экз. чит. зала

P10 - 7365

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

ЭКСПРЕСС-ПРОГРАММА  
ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ "ЭПОС".  
АНАЛИЗ УЧАСТКОВ СПЕКТРА  
СО СЛОЖНЫМ ФОНОМ И ИСПРАВЛЕНИЕ  
АППАРАТУРНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ  
В ОТДЕЛЬНЫХ КАНАЛАХ

**1973**

**ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ**

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

ЭКСПРЕСС-ПРОГРАММА  
ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ "ЭПОС".  
АНАЛИЗ УЧАСТКОВ СПЕКТРА  
СО СЛОЖНЫМ ФОНОМ И ИСПРАВЛЕНИЕ  
АППАРАТУРНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ  
В ОТДЕЛЬНЫХ КАНАЛАХ

---

\* Харьковский государственный университет

## 1. Введение

Определяемые из измеренного спектра физические величины (энергии и интенсивности линий) находятся через положения, амплитуды и полуширины содержащихся в спектре пиков. Нахождение параметров пиков, как правило, усложняется по следующим причинам.

а) Если энергетическое расстояние между двумя или несколькими соседними линиями мало по сравнению с разрешающей способностью измерительной аппаратуры, то возникает сильное перекрытие соответствующих пиков. При этом параметры отдельных пиков становятся сильно взаимосвязанными и их отдельное рассмотрение невозможно.

б) В практике из-за неустойчивой работы электроники или из-за ошибок при передаче информации по каналам связи случается, что в отдельных каналах спектр содержит ложную информацию (выбросы). Если такие выбросы не будут устранены вовремя, то существует опасность неправильного вычисления параметров пиков.

в) Спектрометрическая информация получается всегда вместе с присущим данному эксперименту фоном. При неточном определении вида фона вблизи пиков также возникают дополнительные ошибки в значениях параметров.

Если перечисленные эффекты учитываются недостаточно полно, то в принципе возможная экспериментальная точность не может быть достигнута. Поэтому в экспресс-программе обработки спектров ЭПОС особое внимание уделяется учету таких мешающих факторов. Трудность, названная в пункте а), преодолена путем создания специальной процедуры подгонки для мультиплетов низких порядков (дублетов и триплетов), которая обеспечивает достижение необходимой точности  $\lambda/\lambda$ . В этой работе рассматриваются возмущения, названные в пунктах б) и в). Они всегда могут быть исключены, если их харак-

терная ширина либо много меньше (пункт б), либо много больше (пункт в), чем полуширины истинных пиков. Используемые методы неприменимы в случаях, когда характерная ширина возмущения порядка полуширины пиков в данном спектре, т.к. такие возмущения нельзя отличить от истинных пиков только на основе их структуры. В этих случаях удовлетворительное решение можно получить, либо поставив новый эксперимент в лучших условиях, либо используя дополнительные физические аргументы (если таковые имеются). В противном случае приходится примириться с потерей точности результатов в процессе обработки.

## 2. Исправление аппаратных возмущений в отдельных каналах

При длительном накоплении информации в многоканальных анализаторах или при передаче ее по каналам связи электронная аппаратура работает не всегда достаточно устойчиво. Это приводит, например, к тому, что информация в отдельных каналах портится: содержимое канала становится либо гораздо больше, либо гораздо меньше истинного. При автоматической обработке спектра наличие таких эффектов ("выбросов") приводит к нахождению ложных пиков, неправильному определению начальных значений параметров пиков и фона и т.д., что существенно затрудняет анализ. Поэтому до начала подгонки выбросы необходимо устранить. Интегральной характеристикой спектра, с помощью которой можно найти все сильные выбросы, является для спектра средняя полуширина  $\bar{b}$ , которая найдена в процедуре *intval* /2/. Как видно из блок-схемы ЭПОС /3/, процедура, устраняющая выбросы (процедура *vubrov*), работает только в таких интервалах, для которых  $\chi^2$  велико.

Если известна полуширина пика  $b$ , его амплитуда  $a$  и функция, опи-

сывающая форму пика, то можно оценить ожидаемое максимальное отклонение точки в максимуме пика от соседних экспериментальных точек:

$$\begin{aligned} \text{ум} &= |y_{\text{ex}}(x_0) - y_{\text{ex}}(x_0+1)| \\ &= a \cdot |1 - \exp(-w/b^2)| + 3 \cdot (\sqrt{y_{\text{ex}}(x_0)} + \sqrt{y_{\text{ex}}(x_0+1)}), \end{aligned} \quad (\text{I})$$

где  $y_{\text{ex}}(x)$  - экспериментальное значение в канале  $x$ ,  $x_0$  - положение пика,  $f_{\text{он}}$  - фон,  $w=2.7725887$  для симметричного гауссиана. Второе слагаемое в формуле (I) добавлено для учета возможного вклада статистики. Процедура *vubrov* анализирует слева направо рассматриваемом интервале спектра все экспериментальные значения, беря их по три. Если в этих трех точках средняя точка выше (ниже) соседних, то меньшее из отклонений  $h_1$  сравнивается с величиной  $\text{ум}$ . Если  $h_1 > \text{ум}$ , то считаем, что в данном канале имеется выброс и значение в выбросе заменяется средним значением по двум соседним каналам.

При работе процедуры *vubrov* значение  $a$  нельзя считать точно известным (если имеются выбросы, то процедура *amp11* не может найти правильные амплитуды), поэтому необходимо иметь некоторую простую оценку. Чтобы получить ее, находят максимальное и минимальное значения  $y_{\text{ex}}$  на интервале и их разность  $h_a$  принимается за верхнюю границу величины  $a$  в этом интервале. Может случиться, что либо минимальное, либо максимальное, либо оба значения сразу как раз соответствуют выбросам. Поэтому, считая  $a=h_a$ , проверяют для главного максимума и главного минимума условия (II). В случае выполнения этих условий, экспериментальные значения в соответствующих точках заменяются средними, счетчик числа выбросов *vub* увеличивается на единицу (двойку) и процесс поиска главного минимума и главного максимума повторяется. После этого опять проверяются

условия (II) и т.д. до тех пор, пока число выбросов, обнаруженных при попытке оценить верхнее значение  $a$  на интервале, не будет равно нулю. В последний раз найденное значение  $h_a$  принимается равным  $a$  и после этого по трем точкам, как уже было описано, ищут и исправляют до сих пор не найденные выбросы. Переменная  $v_{уб}$  в конце работы процедуры равняется числу исправленных выбросов.

Процедура содержит два ограничения. Могут быть обнаружены и устранены только :

- "Одиночные" выбросы, т.е. такие, которые в соседнем канале слева и в соседнем канале справа имеют истинно экспериментальные значения. Если выбросов очень много, то процедура работает верно в случае, когда они встречаются не чаще, чем в каждом третьем канале.
- "Сильные" выбросы по сравнению с максимальной амплитудой на интервале. По этой причине анализ на наличие выбросов производится по интервалам. В этом случае  $a$  оценивается более точно и вероятность пропуска выбросов минимальна.

### 3. Методика выделения сложного фона

В первой части программы (ЭПОС-I) с помощью процедуры  $fona$  /2/ уже проводилось приближенное вычисление параметров фона. При этом использовались экспериментальные значения в тех местах, для которых расстояние до ближайших соседних пиков велико по сравнению с полушириной. Меньшие расстояния не использовались, т.к. сначала необходимо с помощью процедуры  $intval$  надежно разделить спектр на интервалы, которые в дальнейшем можно было бы рассматривать отдельно. Описанная здесь методика более тонкого, тщательного по сравнению с результатами ЭПОС-I определения фона (процедуры  $mfoc$  и  $zeks$ )

применяется в программе для тех интервалов, для которых первоначальное приближение неудовлетворительно (достигнутая точность гораздо хуже той, которая возможна в данном эксперименте). В этом месте программы кроме положений пиков в спектре имеется еще дополнительная информация, позволяющая существенно повысить точность определения фона. В качестве дополнительной информации используются положения пиков в спектре, производном от отклонений теоретических и экспериментальных значений в каждом канале.

Экспериментальные значения всегда можно представить в виде :

$$y_{ex} = f_{0n} + z, \quad (III)$$

где через  $f_{0n}$  обозначена искомая функция фона,

$$z = \sum_{j=1}^{u+v} a_j \cdot \exp(-w(x-x_j)^2) \quad (IV)$$

есть сумма гауссианов, описывающих все действительно существующие пики, причем  $u$  - число пиков, найденных простой методикой поиска пиков /2/,  $a, v$  - число еще неизвестных пиков. Через  $a_j$  и  $x_j$  обозначены амплитуды и положения.

С помощью найденных процедурой  $fona$  параметров фона и параметров  $u$  найденных пиков можно вычислить соответствующую теоретическую кривую :

$$y_{th} = f_0 + p, \quad (V)$$

где через  $f_0$  обозначена до сих пор известная функция фона, которая при наличии возмущения в истинном фоне может сильно отличаться от его правильного хода (см. рис.1).  $p$  - сумма гауссианов для всех найденных в ЭПОС-I пиков :

$$p = \sum_{i=1}^u a_i \cdot \exp(-w(x-x_i)^2). \quad (VI)$$

Для  $u$  известных пиков амплитуды  $a_i$  и положения  $x_i$ , входящие в

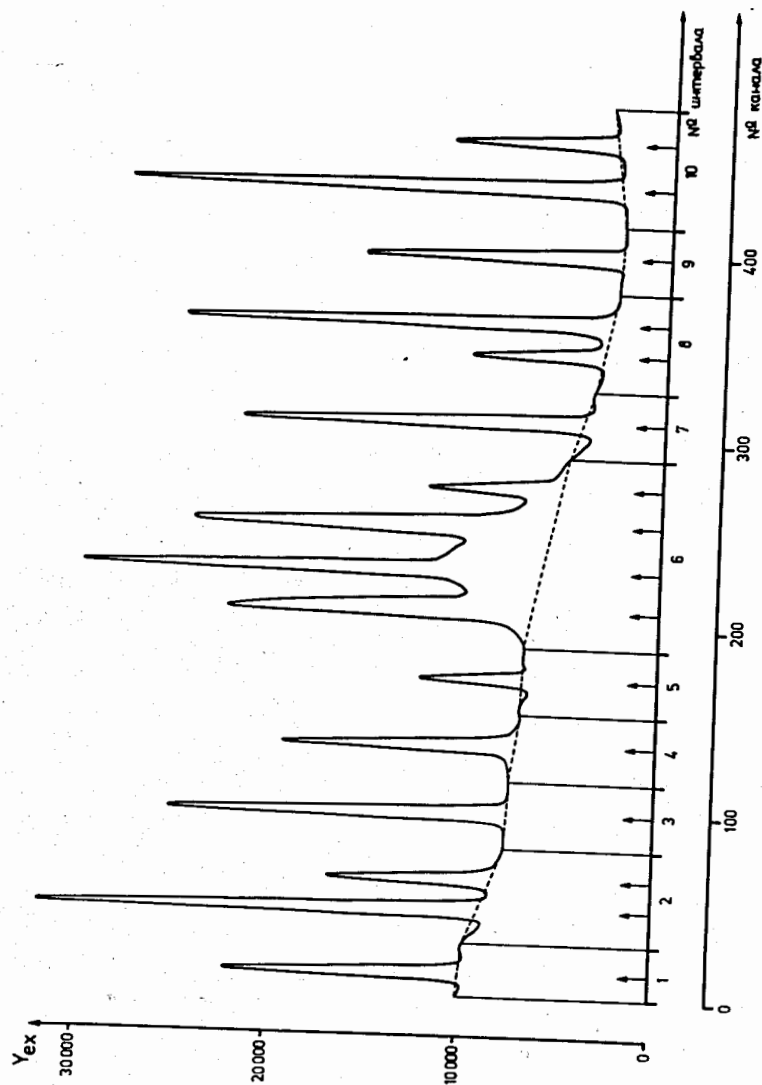


Рис. I

формулу (VI), тоже могут сильно отличаться от их истинных значений. Для описания отклонений между экспериментальной и теоретической кривой используется специальный критерий, который при дальнейшем рассмотрении приводит к относительно простым формулам :

$$\chi^2 = (y_{ex} - y_{th}) \cdot \text{abs}(y_{ex} - y_{th}) / y_{th} . \quad (\text{VII})$$

Это  $\chi^2$  чувствительно к направлению отклонения (имеет знак). На рис. 2 показан спектр вычисленных в каждом канале значений  $\chi^2$ . Отклонение функции фона  $f_0$  от истинного хода фона  $f_{0n}$  является предпосылкой возникновения широких пучностей и впадин в спектре  $\chi^2$ , которые будем называть фоном  $f_{0c}$  этого спектра. Допустим фон  $f_{0c}$  можно найти, тогда, применяя формулу (VII) к  $f_{0n}$  и  $f_0$ ,  $f_{0n}$  можно представить в виде :

$$f_{0n} = f_0 + \text{sign}(f_{0c}) \cdot \text{sqrt}(\text{abs}(f_{0c} - f_0)) . \quad (\text{VIII})$$

Т.к.  $f_{0c}$  квадратично зависит от  $(f_{0n} - f_0)$ , то уже приближенное определение  $f_{0c}$  дает хорошее описание фона  $f_{0n}$ .

Если коэффициенты функции  $f_{0c}$  известны, то, подставляя соотношения (III), (V) и (VIII) в уравнение (VII) и учитывая знаки, получим

$$z = p + \text{sign}(\chi^2) \cdot \text{sqrt}(\text{abs}(\chi^2 \cdot y_{th})) - \text{sign}(f_{0c}) \cdot \text{sqrt}(\text{abs}(f_{0c} \cdot f_0)) . \quad (\text{IX})$$

Это уравнение описывает содержащуюся в интервале спектроскопическую информацию, которая сейчас не содержит фона (см. рис. 3).

Для определения  $f_{0c}$  можно использовать как положения всех пикулов в интервале спектра, так и положения пикулов в соответствующем спектре  $\chi^2$ , которые организованы в единую группу значений  $m$  в порядке возрастания номера канала. Нужные для вычисления параметров  $f_{0c}$  невозмущенные значения  $\chi^2$  всегда можно взять в тех об-

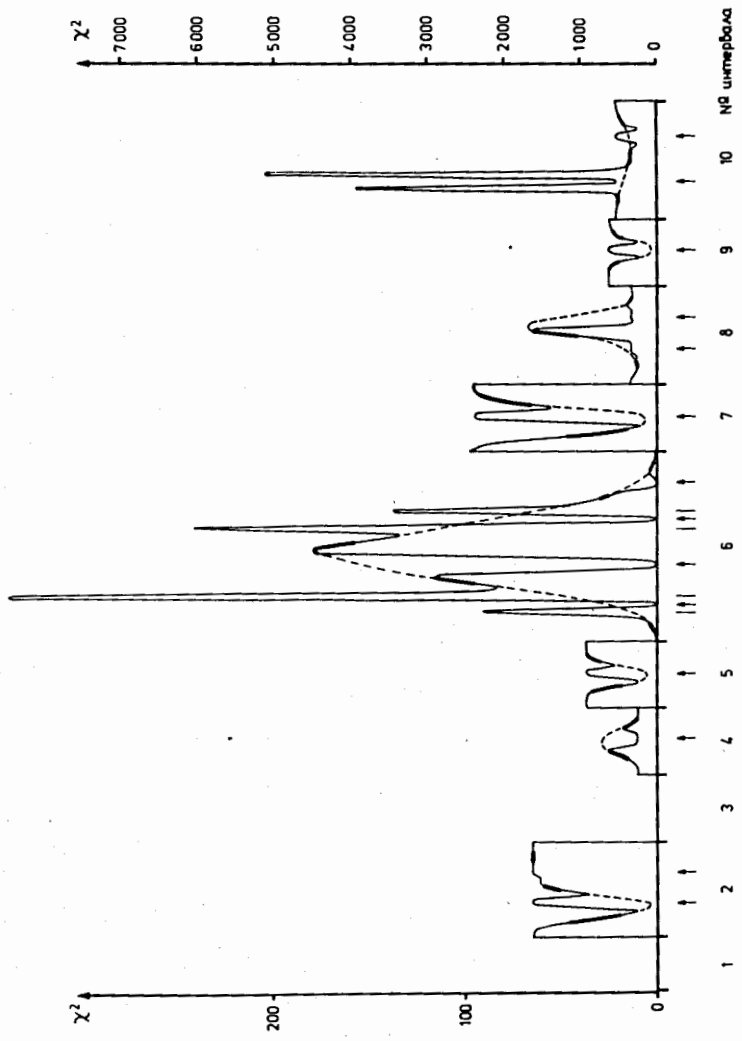


Рис. 2

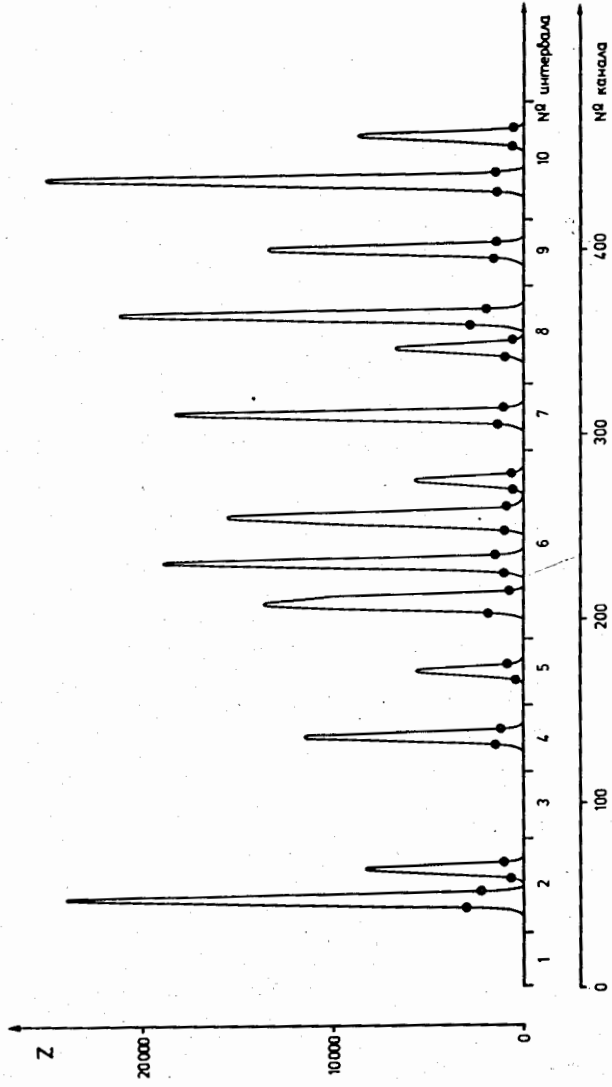


Рис. 3

ластях  $\chi^2$  - спектра, для которых расстояние  $d_1$  между соседними значениями в массиве  $m$  больше, чем удвоенная полуширина  $b$  :

$$d_1 = m_{i+1} - m_i > 2 \cdot b. \quad (X)$$

В отличие от методик определения фона непосредственно из экспериментальных значений, использование структуры спектра  $\chi^2$  позволяет надежно идентифицировать области невозмущенного фона даже при относительно малых расстояниях между пиками, поэтому становится возможным удобное для процесса подгонки дальнейшее разбиение интервала на подинтервалы. В областях, для которых выполняется условие (X), в зависимости от  $d_1$  берем некоторое число значений  $\chi^2$  вблизи канала  $m_{i+1} + d_1/2$ , и точки двух соседних областей аппроксимируются по методу наименьших квадратов полиномом второй или третьей степени. Используя значения  $f_{oc}$  для выбранных таким образом частей интервала, по формуле (IX) вычисляются квазиэкспериментальные значения  $z$  (без фона). Такое постепенное приближение фона в  $\chi^2$  - спектре по частям интервала дает более точные результаты, по сравнению с аппроксимацией во всем интервале, т.к. многие возмущения фона в спектре (например, комptonовские ступеньки) нельзя описать полиномами низких порядков.

Определение хода сложного фона возможно, разумеется, тем точнее, чем больше имеющееся число соответствующих областей. В предельном случае интервала, содержащего только сильно перекрывающиеся пики (все  $d_1 < 2b$ ), разбиение на подинтервалы невозможно и определение фона с использованием только начальных и конечных каналов интервала может привести к большим ошибкам. Более точный анализ таких интервалов возможен при дополнительных затратах (например, улучшение разрешения измерительной аппаратуры или описание комptonовских ступенек с помощью формул).

#### 4. Объяснение обработки спектра на примере

Для объяснения обработки спектра, а также с целью наглядного представления отдельных этапов обработки используются сконструированные спектры. Соответствующий алгоритм легче понять на таком примере, чем с помощью блок-схемы. Т.к. для конструкции все положения и амплитуды пиков заданы, то можно легко проверить точность и надежность методики. Спектр на рис. 1 сконструирован с соответствующими комptonовскими ступеньками, содержит три дублета (1-й и 3-й пик в 6-ом интервале, 1-й пик в 10-ом интервале) и дополнительное возмущение (в основном в 6-ом интервале) с характерной шириной  $12b$  и с превышением над фоном порядка значения самого фона.

При подготовке окончательной обработки в результате работы ЭПОС-I [3] определяются показанные стрелками положения пиков, производится разбиение на 10 интервалов, фон ( $f_0$  в ур.V) в каждом интервале аппроксимируется прямой (штрихованные линии на рис.1) и вычисляется максимальное экспериментальное значение для каждого пика над фоном. Очевидно, что положения пиков определяются при этом уже относительно точно, в то время как максимальные экспериментальные значения, особенно при наличии сильного возмущения фона, могут сильно отличаться от заданных значений амплитуд. Так происходит в 6-ом интервале и в меньшей мере также во 2-ом, 5-ом и 7-ом.

Во второй части программы (ЭПОС-II) рассматриваются сначала интервалы, содержащие малое число хорошо изолированных пиков (в нашем примере все, кроме 6-го), причем полуширина тоже является свободным параметром. В случае хорошей подгонки экспериментальных значений соответствующие полуширины используются для определения функции разрешающей способности детектора  $b(x) = \sqrt{b_1 + b_2 \cdot x}$ . Для конструкции было задано  $b_1=25, b_2=0$  и после подгонки с по-



мощью процедуры  $quabe$  /4/ найдено  $b_1=24.874$  и  $b_2=0.000935$ . Эти значения используются при дальнейшей обработке.

На рис. 2 для отдельных интервалов представлены производные спектры значений  $\chi^2$  ( $f_{oc}$  в ур. VIII). Интервалы 1 и 3 в дальнейшем не рассматриваются, т.к. уже после ЭПОС-I получена достаточная точность. Масштаб справа относится только к 6-ому интервалу, масштаб слева - ко всем остальным. Эти  $\chi^2$ -спектры используются теперь, чтобы исключить из экспериментального спектра фон и идентифицировать мультиплеты. В дальнейшем объяснение ведется только применительно к 6-ому интервалу.

В этом интервале найдено четыре пика. В результате применения процедуры поиска пиков к спектру значений  $\chi^2$  в нем для этого интервала найдены четыре пика, отмеченные штрихами. Оба сорта положений пиков объединяются в массиве  $ma$ . Для определения фона в  $\chi^2$ -спектре ( $f_{oc}$ ) используются только те 5 областей, которые на рис.2 выделены жирными линиями. Ход фона  $f_{oc}$ , полученный в результате вычислений, показан штрихованными линиями. Вблизи пиков в экспериментальном спектре приближение достаточно хорошее, поэтому здесь возникают минимумы в  $\chi^2$ -спектре. По обе стороны дублета появляются пики в  $\chi^2$ , которые в дальнейшем используются для идентификации этих дублетов (см. также 10-й интервал).

Процедура поиска пиков не может работать, если в спектре есть отрицательные значения, поэтому  $\chi^2$ -спектры в каждом интервале приподняты. Из сравнения рис. 1 и 2 видно, что  $\chi^2$ -спектр очень чувствительно реагирует (выпуклая форма  $\chi^2$ -фона) на факт наложения комptonовских ступенек и пиков (интервалы 4 и 8).

Применение ур. (IX) приводит к показанному на рис. 3 спектру экспериментальных значений без фона  $z$ . Если интервал содержит

больше одного пика, то теперь возможно надежное разбиение его на более мелкие подинтервалы. Разбиение при этом производится там, где значение  $z$  меньше определенной наперед заданной части средней амплитуды соседних пиков (например, 5%). На рис. 3 точки, соответствующие границам подинтервалов, выделены крупными кружками. Так, 6-й интервал разбивается на 4 подинтервала, которые в дальнейшем можно обрабатывать независимо. Вся физическая информация сконцентрирована в относительно узких диапазонах каналов. Только они используются при подгонке, за счет этого существенно уменьшается время обработки. Результаты для обсуждавшегося примера приведены в таблице, показаны результаты ЭПОС-I, ЭПОС-III и истинные значения параметров, заложенные при конструкции. Буква D отмечает дублет, звездочки - такие полуширины, которые были вычислены из функции  $b(x)$ .

## 5. Заключение

Обычно используемые методы автоматического выделения фона в экспериментальном спектре либо недостаточно надежны, либо являются медленными и требуют большого объема памяти ЭИМ (последнее относится к Фурье-анализу). Благодаря использованию производных  $\chi^2$ -спектров, описанная здесь методика очень чувствительна к структуре экспериментального спектра, и позволяет поэтому хорошо находить точки чистого фона, надежно и быстро выделять независимые участки спектра. Таким образом, возникает возможность отказаться при выборе разумной формы фона от зрительного анализа спектра человеком с помощью дисплея и исключить тем самым на этом этапе влияние субъективного фактора. Можно надеяться, представленная методика окажется полезной при решении задачи о полной автоматизации обработки спектральной информации.

Таблица

№ участка	ПОЛОЖЕНИЕ ПИКОВ X (каналы)			ЭМИТТИРУЕМЫЕ ПИКОВ B (отсчеты)			ПОЛУЧИЛИСЯ ПИКОВ B (каналы)		
	I-ЭОПЕ	III-ЭОПЕ	•КЕНЕ•ЛОИ	I-ЭОПЕ	III-ЭОПЕ	•КЕНЕ•ЛОИ	I-ЭОПЕ	III-ЭОПЕ	•КЕНЕ•ЛОИ
1	14.191	-	14.19	12332	-	12600	4.942	-	5.000
2	48.337 64.591	48.339 64.645	48.34 64.60	23081 8590	23724 8519	23700 8500	4.924 5.037	5.017 4.983	"
3	99.738	-	99.74	17712	-	17600	5.022	-	"
4	136.379	136.384	136.39	12046	11670	11500	5.155	5.070	"
5	171.869	171.871	171.85	5315	5708	5800	4.724	4.889	"
6	208.405	207.108	207.06	16041	11998	12300	-	5.007*	"
	-	211.292	211.34	-	8445	9100	-	5.007*	"
	230.190	230.174	230.17	23953	19019	18900	-	5.009*	"
7	254.471	252.625	252.43	19174	10061	9400	-	5.011*	"
	-	256.069	255.91	-	11236	12100	-	5.011*	"
8	274.471	274.559	274.62	6849	5673	5700	-	5.013*	"
	309.847	309.847	309.85	17774	18336	18300	4.907	5.004	"
9	346.301	346.285	346.29	6874	6771	6800	5.071	5.019	"
	363.320	363.320	363.34	21783	21448	21300	5.080	5.024	"
10	399.456	399.457	399.46	13531	13703	13700	4.973	5.006	"
	436.444	435.838	435.72	25624	15752	16800	5.463	5.024*	"
10	-	437.330	437.58	-	11924	11300	-	5.024*	"
	460.942	460.942	460.93	8594	8706	8700	4.934	4.997	"

Δ x/b

Δ a/a

(%)

%

D

D

D

D

D

D

D

D

D

D

D

D

D

D

D

D

D

## ЛИТЕРАТУРА

1. Г. Элер, П.М. Гопыч, Г.В. Винель, В.Хабенихт, Л.А. Вьлова, ОИЯИ, Р 10-7367, Дубна, 1973.
2. Г. Элер, П.М. Гопыч, Г.В. Винель, В.Хабенихт, Л.А. Вьлова, ОИЯИ, Р 10-6818, Дубна, 1972.
3. Г. Элер, П.М. Гопыч, Г.В. Винель, В.Хабенихт, Л.А. Вьлова, ОИЯИ, Р 10-6817, Дубна, 1972.
4. Г. Элер, П.М. Гопыч, Г.В. Винель, В.Хабенихт, Л.А. Вьлова, ОИЯИ, Р 10-7364, Дубна, 1973.

Рукопись поступила в издательский отдел  
27 июля 1973 года