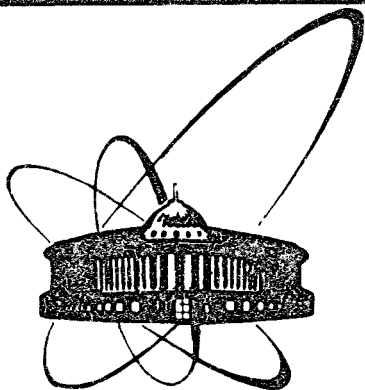


82-105



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

192-82

19/4-82

P10-82-105

В.Б.Злоказов

**АСТИВ – ПРОГРАММА
АВТОМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ
 γ -СПЕКТРОВ**

Направлено в журнал "Computer Physics
Communications".

1982

Введение

Программа АСТIV предназначена для полного прецизионного автоматического анализа серии γ или X -спектров, а также дополнительно для исследования качественного и/или количественного состава образцов вещества, спектры которых анализировались в экспериментах с применением методики активационного анализа. По сравнению с другими опубликованными программами такого же типа (см. ссылки в 1/1), АСТIV дает следующие дополнительные возможности:

1. Возможность работы в широком диапазоне режимов от полностью автоматического (при минимуме входных данных) до полупручного (для получения более точных результатов); есть возможность стыковки с программами, использующими интерактивную технику.
2. Автоматический поиск пиков и обработка методом наименьших квадратов (м.н.к.) используют реальную форму пиков, что повышает надежность и качество анализа мультиплетов и уменьшает систематическую ошибку анализа; алгоритмы всех этапов анализа насыщены множеством различных математических приемов, повышающих качество работы программы в целом.
3. Есть возможность обрабатывать спектры на основе списка энергий, представляющих интерес, или на основе библиотеки изотопов.
4. Блок программы активационного анализа является частью пакета АСТIV'a и позволяет осуществить автоматически полный цикл анализа спектров вплоть до определения качественного и количественного состава облученных проб по методу эталонов или по формуле активации.
5. Программа АСТIV имеет модульную структуру и может работать как на больших ЭВМ (CDC-6500, IBM-360/40), так и на средних (БЭСМ-6, Минск-32) и малых (PDP-11/70 , слово 16 бит). На средних и малых ЭВМ требуется применение оберлейной загрузки. Про-

грамма ориентирована на обработку спектров, поступающих с различных носителей (перфокарты, с форматной или бесформатной информацией, перфоленты, МЛ и т.д.).

В программе предусмотрены возможности работать в пакетной или интерактивном режимах с выдачей результатов как на печатающие устройства, так и на экран терминала.

Ниже излагаются процедуры отдельных шагов алгоритма, осуществляемого программой, а также сопутствующие математические рассуждения.

2. Калибровка

АСТIV строит (по желанию пользователя) 2 калибровочные кривые:

а) для перевода каналов в энергии:

$$E = E(x) \quad , \quad \text{где } x - \text{ канал, } E - \text{ энергия (2.1)}$$

б) для перевода площадей пиков в интенсивности излучений:

$$e = e(E) \quad , \quad (2.2)$$

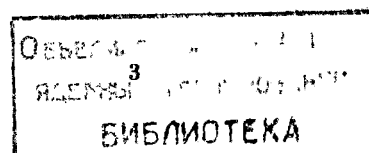
где E - энергия, e - эффективность регистрации γ - или X -квантов с энергией E .

Если пик с энергией E_1 имеет площадь A , то его интенсивность I будет вычислена по формуле:

$$I = A/e(E_1) \quad .$$

Зависимость (2.2) можно трактовать более обще, как результат всевозможных деформаций спектра, при которых происходит неполная регистрация γ -квантов (мертвое время детектора при не очень сильном разбросе периодов полураспада излучателей, самопоглощение γ -квантов в образце и т.д.)

Общепринятый способ для построения нелинейной зависимости (2.1) и зависимости (2.2) состоит в выборе комбинации элементарных функций с параметрами, которые далее находятся методом наименьших квадратов по экспериментальным множествам $\{x_1\}$, $\{E_1\}$ и $\{e_1\}$. Такой путь был отвергнут при создании АСТIV'a ввиду того, что будучи применимым в вычислительном отношении, он не дает требуемого качества в описании функций (2.1), (2.2), поскольку экспериментальные физические кривые имеют ярко выраженную тенденцию не укладываться в широко распространенные элементарные функции и их суперпозиции. Стремления при обработке экспериментальных данных получать алгебраическую формулу (сколь бы малоудобной и плохо читаемой она ни была) необосновано.



также и потому, что физического смысла (для случая калибровки) эта формула не имеет, да от нее это и не требуется: важно лишь, чтобы она хорошо описывала реальные зависимости (2.1) и (2.2), т.е.:

- а) подавляла влияние статистических (осцилляций) в $\{E_i\}$ и $\{e_i\}$;
- б) давала возможность вычислять значения E и e в промежуточных значениях аргументов x и E .

Однако и фильтрация, и интерполяция могут быть выполнены прямыми методами, не требующими описания (2.1) и (2.2) в виде алгебраических формул.

Подавление осцилляций у дискретной функции f_i может быть выполнено с помощью фильтра типа $|2|$, который с учетом плавного характера зависимостей (2.1) и (2.2) может быть упрощен следующим образом: построить огибающую ε_i , повторяющую общий контур функции f_i , но без ее осцилляций. Математически это означает: найти ε_i , минимизируя выражение

$$\sum (\varepsilon_i - \varepsilon_{i+1})^2 + \lambda \sum \omega_i (\varepsilon_i - f_i)^2, \quad (2.3)$$

где ω_i - величина, обратная квадрату ошибки (дисперсии) величины f_i , а λ - множитель Лагранжа, регулирующий степень подавления осцилляций и близости к f_i .

Интерполяция дискретной функции \tilde{f}_i (получена из f_i после сглаживания с помощью фильтра (2.3)) также может быть выполнена непосредственно по значениям $\{\tilde{f}_i\}$. При этом условия непрерывности или гладкости (на которых основывается интерполяция) можно также ввести, не прибегая к алгебраическим формулам. Например, пусть требуется получить значение \tilde{f} в точке x_3 , если известны значения f в точках x_1, x_2, x_4, x_5 и $x_2 < x_3 < x_4$ (т.е. осуществить интерполяцию более высокого порядка, чем линейная). Тогда значение \tilde{f}_3 может быть найдено из условия: минимизировать выражение

$$\sum_{i=2}^4 \{\tilde{f}_i''\}^2. \quad (2.4)$$

Интерполяция (2.4) не только использует информацию о 2 разностях функции \tilde{f}_i , но и дает решение с минимальной средней кривизной, т.е. имеет все достоинства сплайновой интерполяции, не требуя, однако, задания алгебраической формулы для \tilde{f} .

Решение задачи (2.3) осуществляется с помощью очень простых рекуррентных соотношений $|2|$. Задача (2.4) решается непосредственно (найти минимум функции (2.4), зависящей от одной неизвестной \tilde{f}_3).

График дискретной функции \tilde{f}_i , иллюстрирующий работу процедур (2.3) и (2.4), приведен на рис. 1.

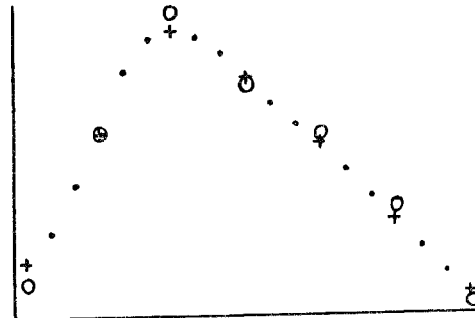


Рис. 1. Сглаживание и интерполяция дискретной функции

- - значение исходной функции;
- ⊕ - значение сглаженной функции;
- - значение интерполяционной функции.

Для осуществления интерполяции используется подпрограмма LAPIN, которая дополнительно проверяет функцию \tilde{f}_i на монотонные участки (на монотонных участках лучшие результаты дает линейная интерполяция).

Программа ASTIV строит первоначальные зависимости на основе заданных пользователем данных $\{E_i\}$, $\{X_i\}$ и $\{e_i\}$, $\{E_i\}$, а затем по результатам обработки калибровочного спектра (с известными линиями) может автоматически уточнить построенные зависимости.

3. Библиотека описаний изотопов

Программа может использовать информацию об изотопах (элементах) как для лучшей разметки спектров (т.е. разбивки их на участки и поиск пиков в них), так и для определения качественного (и количественного) состава образца, спектр которого анализируется.

Эта информация состоит из описаний характеристик каждого изотопа, перфорированных на отдельные карты, и из нее для каждого случая

анализа спектров формируется оперативная библиотека описаний изотопов, в которую включаются лишь карты с описаниями тех изотопов, присутствие которых в образце имеет заметно отличную от нуля вероятность. Благодаря этому такая библиотека может быть помещена в оперативную память, что существенно ускоряет темп работы. Детали описаний и компоновки библиотеки приведены в подробной инструкции для пользователей, которая отперфорирована на перфокарты и является частью пакета программы АСТIV.

4. Ввод спектра

Подробное описание ввода спектра с различных носителей приведено в инструкции к АСТIV'у.

5. Модель пика

Сказанное ранее (в § 2) о роли аналитических формул в описании реальных данных в еще большей степени относится к построению модели пика. Хотя почти общепризнано, что современный прецизионный детектор способен воспроизвести (на изолированном пике с большой статистикой) форму одиночной линии сколь угодно точно ^{13/}, не прекращаются попытки относить формулы для описания пика, сколь бы громоздкими и плохо интерпретируемыми с точки зрения физики эти формулы ни были ^{14/}. Более того, в работе ^{15/} усматривается даже некая повышенная "научность" в подходе, используемом для описания формы пика такие функции, как $\exp(x)$, $\arctg(x)$ и т.д. Этот подход назван там "аналитическим" в противоположность "эмпирическому", используемому в гистограммах в качестве моделей пика. Здесь надо заметить, что "аналитическими" вышеупомянутые функции именуются в обиходном жаргоне, а в математике они называются элементарными, откуда следует, что с большим правом подход, основанный на их использовании, надо называть "элементарным". В математике термин "аналитический" применяется к функциям (для случая действительного переменного), которые могут быть представлены в виде ряда Тейлора. В этом смысле гистограммы, дополненные до полных функций с помощью, например, интерполяции, являются оными, что ни на есть аналитическими (даже "более аналитическими", чем многие другие, поскольку могут быть представлены как полиномы). Это, однако, нам ничего не дает, т.к. в памяти ЭВМ все функции, независимо от их происхождения, существуют только как таблицы (т.е. гистограммы).

72 4 13 17
H2 267
Более серьезным возражением против гистограммного подхода являются трудности с параметризацией таких моделей. Однако в работе ^{16/} указан универсальный метод параметризации таких гистограммных моделей, позволяющий увязать форму реального пика $f(x)$ с его моделью $m(x)$ так, что получается зависимость, включающая всего 3 параметра A, P, W (в простейшем варианте):

$$f(x, A, P, W) = Am \left(\frac{x-P}{W} \right), \quad (5.1)$$

причем эти параметры имеют четкий физический смысл и, более того, их значения являются искомыми в процессе обработки каждого пика. Их смысл таков: A - амплитуда, P - положение (центр), W - полуширина пика.

Следующее возражение: подлинный характер отличий каждого отдельного реального пика от его модели является более сложным, чем это отражено зависимостью (5.1). На это можно ответить:

1. Зависимость (5.1) выведена ^{16/} из самих общих логических отношений между моделью и образом при самых широких топологических преобразованиях одного в другое; эмпирические параметризации игнорируют эти отношения; следовательно, в методическом плане параметризация (5.1) предпочтительнее как наиболее свободная от субъективизма и наиболее общая.
2. Задача обработки спектра - это задача декомпозиции функции на компоненты. Мы не знаем прямых методов решения такой задачи и вынуждены решать ее методом наименьших квадратов, который, однако, не имеет ее своей целью. Таким образом, успешная декомпозиция функции может быть лишь побочным результатом м.н.к. - методики, которая может иметь место лишь при выполнении ряда условий. Важнейшим из них является небольшое число параметров у функций компонент и их максимальная некоррелированность. Какие бы тонкие нюансы в изменении функции пика (по сравнению с моделью) ни описывали параметры, если их будет много, или если они будут связаны тонкими зависимостями, декомпозиция спектра будет плохой (хотя фиттирующая суммарная функция будет идеально проходить по экспериментальным точкам). Зависимость (5.1) предлагает некоторый оптимум, при котором поддерживается хороший баланс между точностью описания отдельного пика и надежностью декомпозиции.
3. Точно такое же возражение можно адресовать и "аналитической" параметризации, поскольку не существует математически обоснованного описания трансформации аппаратурной линии пика в результате все-

возможных процессов в детекторе, и "аналитические" формулы находят- ся обычно примитивным подбором /4/.

Частным случаем формулы (5.1) является гауссиан, но и асиммет- рические пики $f(x)$ связаны с асимметрической моделью $m(x)$ точно таким же соотношением (в результате чего отпадает необходимость вво- дить специальные параметры для учета асимметрии). Правда, в некото- рых видах спектров (особенно спектров X -лучей) асимметрия может плавно меняться на протяжении спектра. Чтобы не заводить множества моделей для одного спектра, в программе АСТИВ использован такой прием. Если есть основания полагать, что такие характеристики моде- ли, как асимметрия и эксцесс меняются вдоль спектра, следует ввести 2 модели: модель для пиков в начале и модель для пиков в конце. Про- межуточные модели будут получаться как взвешенные полусуммы этих 2 крайних моделей.

Модели (или 2 модели) могут быть получены как в результате не- зависимого эксперимента, так и взяты из обрабатываемого спектра. При этом лишь желательно, чтобы модель имела большую статистику и была определена на более густом множестве каналов, чем обрабаты- ваемые пики (для случая модели, получаемой независимым экспериментом).

Моделью фона является полином (в форме Чебышева). Однако при обработке некоторых спектров X -лучей в начальной части спектра фон может иметь резко неполиномиальный характер. В программе АСТИВ предусмотрен аппарат для подавления такой нерегулярной компоненты фона. Его математической основой также служит фильтр (2.3), в кото- ром дополнительно сильно уменьшены веса ω_i в пиковых областях. Полученный минимизацией (2.3) фон (без постоянной оставляющей) вы- читается из участка спектра (однако веса точек спектра для последу- ющего м.н.к.-анализа учитывают эту фоновую компоненту). Параметр λ принимает максимальное значение в начальной области спектра (где нерегулярность фона максимальная) и уменьшается к концу спектра.

6. Разметка спектра

Разметка спектра, т.е. разбиение его на интервалы, содержащие изолированные пики (или неразрешенные мультиплеты) и фон по краям, осуществляется различными способами:

- 1) автоматический способ;
- 2) ручная разметка;
- 3) разметка по списку энергий, представляющих интерес;
- 4) разметка на основе библиотеки изотопов.

Алгоритмы способов 1), 3), 4) описаны подробно в /7/. Ручная размет- ка может использоваться для повторной обработки тех участков спектра, которые могли бы быть плохо обработаны в автоматическом режиме.

7. (Обработка спектра)

Хотя проблемам анализа спектров посвящена огромная литература, начиная с псевдоматематических "исследований", написанных физиками, хорошо представляющими себе физическую задачу, но не (вполне) грамот- но трактующими ее математические аспекты, и кончая (немногочисленны- ми, правда) работами, написанными профессиональными математиками, где однако часто речь идет скорее об абстрактном анализе данных, чем о конкретных проблемах спектрометрии, трудно указать широко известную работу, в которой бы специфическая задача анализа аппаратных спектров была изложена математически достаточно полно и корректно. Такой задачей является задача декомпозиции аппа- ратного спектра на компоненты, из которых он состоит. Формально речь идет о проблеме декомпозиции функции - проблеме, которой нет анало- га в классической математике (если не считать анализа Фурье, который, однако, является лишь весьма тривиальным аналогом этой проблемы), хо- тя для ее решения применяется классический математический аппарат - м.н.к.

Применительно к γ -спектрам эта проблема подразделяется на 2 важных задачи:

- а) разложение участка с изолированным пиком на пик и фон;
- б) разложение участка с мультиплетом на отдельные пики и фон.

К сожалению, не существует прямых методов (не считая весьма неточных методов типа stripping) для решения этих задач, поэтому приходится прибегать к косвенному методу - м.н.к. Для этого каждой компоненте спектра сопоставляется ее описание - функция, зависящая от параметров, и сумма таких функций подгоняется (подбором парамет- ров) к экспериментальному спектру в надежде, что для удовлетворения принципа наименьших квадратов функции будут вынуждены скомпоновать- ся в их сумме точно таким же образом, как это делают их реальные аналоги в спектре, и тем самым дать декомпозицию спектра. К сожа- лению, реальная ситуация, если ее тщательно проанализировать с позиции строгой математики, обстоит далеко не столь просто, чтобы эти надеж- ды всегда и самым лучшим образом оправдывались. М.н.к. - это метод, преследующий свои собственные цели, а именно: дать оптимальную (в смысле наименьших квадратов) оценку суммарной регрессии, проходящей

по экспериментальным точкам, совершенно независимо от того, "правильно" или нет располагаются компоненты внутри этой регрессии; лишь бы их сумма шла "правильно". (см. рис. 2).

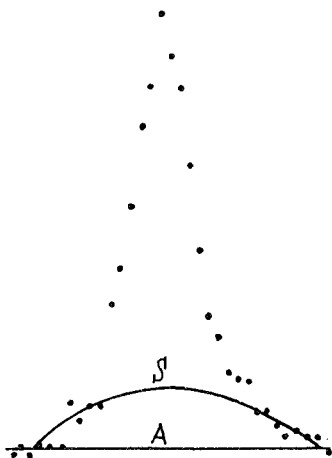


Рис. 2. Пример хорошей подгонки, но плохой декомпозиции. Черта с буквой S означает фон, проведенный программой SAMPO /IO/. Недостаток SAMPO состоит в том, что она не добавляет фона по краям пика. Это может привести к плохому отделению пика от фона. Для сравнения указан фон, проведенный программой ASTIV (буква А снизу). χ^2 подгонки, даваемой обеими программами, одинаков.

Соответственно этому м.н.к. - оценки параметров, хотя и могут в принципе обладать такими замечательными свойствами, как несмещенность, эффективность, минимальность дисперсий и т.д., если брать их как параметры суммарной регрессии (да и то не для спектров, поскольку как отдельные компоненты, так и суммарная модель спектра не вполне отражают его многочисленные мелкие детали) но, если рассматривать их как описатели отдельных компонент, они не обязаны быть ни несмещенными, ни эффективными оценками их характеристик. Например, взяв достаточно длинный отрезок ряда Фурье, мы можем с любой точностью подогнать наш экспериментальный спектр (вплоть до полного совпадения точек). Но оценки истинных характеристик пиков (т.е. положений и

площадей отдельных пиков) будут связаны с параметрами ряда настолько сложными зависимостями, что будут иметь огромные дисперсии, и даже могут оказаться несостоятельными, если эти зависимости не будут обладать свойством единственности (практически это будет иметь место при их очень сильных взаимных корреляциях), т.е. при идеальной подгонке суммарной линии декомпозиция не состоится вообще.

Подробное и строгое изложение теории декомпозиции выходит за рамки данной работы. Здесь мы ограничимся лишь ссылкой на условия хорошей декомпозиции при заданной параметризации, приведенные в § 5:

- а) небольшое число параметров и их непосредственная связь с искомыми величинами;
- б) максимально возможная некоррелированность параметров.

Параметризация (5.1) удовлетворяет обоим этим условиям. Но хорошая подгонка, хотя и не является достаточным условием хорошей декомпозиции, является все же ее необходимым условием. Поэтому в программе ASTIV приняты меры для обеспечения достижения хорошего качества м.н.к.-подгонки. Для этого используется комбинация процессов Гаусса-Ньютона, (с демпфированием) и Ньютона, что повышает надежность минимизации и позволяет осуществить эффективный контроль за правильным завершением процедуры минимизации. Такие параметры, как длина шага в итерациях и величина демпфирующего фактора, доступны пользователю и позволяют ему (если у него есть достаточный опыт для этого) выбрать оптимальную стратегию минимизации, или пользоваться стандартными возможностями.

Детали выбора стратегии минимизации и проверки качества подгонки подробно изложены в инструкции.

Результаты разложения спектра иллюстрируются соответствующими графиками на АЦПУ (или на экране терминала).

8. Качественный и количественный анализ

Результатом обработки γ -спектра является сводная таблица результатов - список найденных положений и площадей статистически достоверных пиков, которые с помощью калибровочных данных переводятся в энергии и интенсивности линий. Следующий этап - определение возможных пиков уточки. Все энергии E_k из списка проверяются на удовлетворение неравенству:

$$|E_i - E_j| = \left\{ \begin{array}{l} 511 \pm \Delta \\ 1022 \pm \Delta \end{array} \right\} \text{ где } \Delta - \text{ заданная погрешность. (8.I)}$$

Энергии, удовлетворяющие (8.I), вы печатаются.

Следующий этап - качественный анализ, т.е. определение изотопов (из библиотеки), которым могут принадлежать линии из сводной таблицы. Его алгоритм прост: отнести к j -му изотопу те линии из списка, энергии которых наиболее близки к энергиям, а отношения соответствующих интенсивностей к отношениям квантовых выходов линий данного изотопа. Соответственно этому алгоритм качественного анализа состоит в следующем.

Для произвольного E (энергия) и Δ (точность определения энергии) ближайшей к E считается линия из списка, расстояние от которой до E является 1) наименьшим, 2) не превосходящим Δ . Для каждого изотопа проверяется наличие ближайшей линии в списке к главной линии данного изотопа. Если таковой не находится, данный изотоп считается отсутствующим в образце. Если находится, то она приписывается данному изотопу, а ее интенсивность запоминается. Далее находятся линии из списка, ближайшие к остальным энергиям данного изотопа, и если они находятся, то приписываются данному изотопу, а их интенсивности делятся на интенсивность линии, ближайшей к главной, и полученные отношения печатаются и могут быть сравнены с соответствующими квантовыми выходами.

Алгоритм количественного анализа выглядит несколько иначе. Для главной линии каждого изотопа тоже ищется ближайшая линия в списке, но если она не находится, то об этом выдается лишь сообщение, а сам изотоп из рассмотрения не выбрасывается. Далее к каждой энергии каждого изотопа поочередно ищется ближайшая линия из списка, и если она находится, то ее интенсивность пересчитывается в массу соответствующего изотопа. Пересчет осуществляется двумя способами: по методу эталонов и по формуле активации. Предпочтение отдается методу эталонов, и режим счета по формуле включается, лишь если нет соответствующих данных по эталону для проверяемого изотопа.

а). Метод эталонов.

Исходной информацией для определения массы изотопа по этому методу являются: $A_e, \Delta A_e, m_e, \Delta m_e, SW$, где $A_e, \Delta A_e$ - площадь пика и ее ошибка в спектре, снятом с эталона; $m_e, \Delta m_e$ - масса и ее ошибка изотопа в эталонной пробе; SW = вес эталонной пробы.

После того, как изотоп идентифицирован по какой-либо энергии в списке, извлекается информация о соответствующем пике = его площадь A_s и ошибка ΔA_s . Тогда масса изотопа m_s вычисляется на основе следующего соотношения:

$$m_s = \frac{m_e A_s}{A_e C W_s - W_e A_s} \quad (8.2)$$

где W_s = вес образца, $C = \exp(T, C_s, A_s, M_s) / \exp(T, C_e, A_e, M_e)$
 $C_s, A_s, M_s, C_e, A_e, M_e$ = время охлаждения, активации и измерения для образца и эталона, соответственно (в минутах);
 T - период полураспада (в минутах).

$$\exp(T, C, A, M) = T \cdot \exp(-\ln 2 C / T) (1 - \exp(-\ln 2 A / T)) (1 - \exp(-\ln 2 M / T))$$

б). Вычисления по формуле.

Если нет информации об эталонах, то масса изотопа вычисляется по формуле:

$$m_s = \frac{A_s \cdot 1,93A}{\epsilon \cdot a \cdot s \cdot Q \cdot B \cdot \exp(T, C_s, A_s, M_s)} \quad (8.3)$$

где A - атомный вес изотопа,
 ϵ - эффективность регистрации,
 a - распространенность,
 s - сечение реакции,
 Q - квантовый выход,
 B - нейтронный поток.

Ошибки массы вычисляются в зависимости от режима либо по формуле (8.2), либо по (8.3).

9. Учет периода полураспада

Если имеется последовательность γ -спектров, измеренная через равные временные промежутки Δt , то мы можем рассматривать эту последовательность как один двумерный спектр $P(E, t)$ (энергетический спектр при каждом фиксированном t ; временной спектр в каждой фиксированной точке E).

Модель каждого пика здесь будет иметь вид:

$$P(E, t) = A_m \left(\frac{E - E_0}{W} \right) \exp(-\ln 2 t / T)$$

где E_0, W - положение и полуширина данного пика в энергетической шкале, а T - период полураспада изотопа, к которому данный пик относится.

Обработка таких двумерных спектров может быть осуществлена программой DOMUS /8/ (модифицированный вариант). Такая обработка позволяет идентифицировать изотопы гораздо надежнее, так как дает возможность использовать полученные при обработке значения T_1 (периоды полураспадов). Это особенно важно в тех случаях, когда изотопы не разделяются по энергии (сильное перекрытие соответствующих пиков).

10. Структура программы

Программа включает в себя:

- 1) головную подпрограмму ACTIV, которая управляет работой всего комплекса; ACTIV вводит входные данные, представляющие собой команды на выполнение определенных операций и соответствующие числовые величины и передает управление подпрограммам REAC1, REAC2, REAC3, REAC4, которые управляют конкретным выполнением операций.
- 2) подпрограммы INSPE, INPUT, IMAGT, IPART, IOTHS для ввода спектра;
- 3) подпрограммы AUGA, CALPC, LINCA, INCAL, AUXIC, CLITR, CALAR, CHEP3 для калибровки;
- 4) подпрограммы ISLIB, INISO, ITEXT, для работы с библиотекой изотопов;
- 5) подпрограмму CORBC для правки выбитых точек;
- 6) подпрограммы WIFUD, WIDET для определения функции полуширины;
- 7) подпрограммы SAMOC, FIMOB, POLCA, UPDAM, MOPR для построения моделей;
- 8) подпрограммы MARKS, MARKE, MARIS, PIPEA, CORIN, SENSE, RESOA, CHESR, COWIC для разметки спектра;
- 9) подпрограммы PREPC, SBACK, RESCC, CHEPC, WHDEF для подготовки к подгонке спектра;
- 10) подпрограммы FITPC, PRANA, RINCO, LSM76, OUTIN, PODEM, SMXIN, AMXNS, ARIGA, DAPR, PROO2, CALF для подгонки спектра;
- 11) подпрограммы OUTPC, GRAPC, TABLC для вывода результатов подгонки на печать;
- 12) подпрограммы ACTAN, QUALA, PREQN, ILITA, CHEML, COTMI, INETA для активационного анализа;
- 13) вспомогательные подпрограммы ARRAN, CHELI, CHEPI, LAPIN, OPOSP, OUPUT, MAXNM, COMPR, SMOSI, INIPG, PROGM, RECOM;
- 14) помеченные COMMON -блоки: COVL, CALIBL, MOD1, MOD2, MODB, COVLC, RBUCH, SBLOCK.

Комментарии к работе и назначению каждой подпрограммы содержатся в тексте этих подпрограмм.

11. ACTIV на PDP-11/70

При постановке программы на PDP-11/70 целесообразно главную подпрограмму ACTIV оформить в виде MAIN PROGRAM, включив в нее (на указанное место) программу для чтения спектра в массив SP. При сборке программы необходимо использовать оверлейную структуру, например, задаваемую такой таблицей:

```
.ROOT ACTIV, F5, F4, F1
.NAME S1
F1 : .FCTR S1-(AMXNS, ARRAN, CHELI, CHEPI, COTMI-COMPA, INPUT, F11)
F11: .FCTR *(SENSA, IMAGT, IOTHS, IPART, LAPIN, CALAR-CHEP3, F12)
F12: .FCTR *(DAPR, OPOSP, OUPUT, PODEM, PROO2, RINCO, SBACK, OUTIN, F13)
F13: .FCTR *(SMXIN, WHDEF, WIDET, INETA, CALF-(ARIGA, COWIC-MAXNM))
.NAME S4
F4 : .FCTR S4-(WIFUD, PIPEA-(RESOA, CHESR), RESCC, F41)
F41: .FCTR *(CORBC, UPDAM-MOPR, PRANA, POLCA, LSM76, MARKE-INCAL, F42)
F42: .FCTR *(CLITR-(QUALA -CHEML-AUXIC, GRAPC), ITEXT, PREQN, F43)
F43: .FCTR *(SMOSI, CALPC-LINCA-COMPR, CORIN, FIMOB, ILITA)
.NAME S5
F5 : .FCTR S5-(REAC3-(OUTPC, FITPC, PREPC-CHEPC), F51)
F51: .FCTR *(REAC1-(AUGA, ISLIB-INISO, INSPE), INIPG-PROGM, RECOM, F52)
F52: .FCTR *(REAC2-(MARKS, SAMOC, MARIS), REAC4-(TABLC, ACTAN))
.END
```

Собранная программа позволяет обрабатывать спектры длиной не более 2048 каналов при числе пиков в спектре не более 100.

12. Входные данные и тест

Входные данные представляют собой команды (текст) и сопутствующую числовую информацию (в бесформатном виде), например:

FIT	I карта
1.	2 карта

означает: осуществить подгонку участков спектра с помощью м.н.к. и вывести графики подгонки на печать.

Таблица 1)

Номер пика	Положение	σ МНК	σ выборочное	Площадь	σ МНК	σ выбор.
130	130,005	0,020	0,024	26464	453	478
207	206,853	0,070	0,055	5342	340	209
306	306,036	0,020	0,034	21076	439	115
361	361,297	0,080	0,105	6208	392	340
563	562,837	0,020	0,030	20352	357	399
655	655,317	0,100	0,160	5930	398	270
775	774,627	0,020	0,021	24840	450	226
818	817,627	0,100	0,116	5313	447	582
863	863,343	0,020	0,015	28648	461	601
924	924,240	0,080	0,046	6045	350	325
1095	1095,040	0,110	0,079	1191	77	190
1196	1195,410	0,030	0,026	6729	107	93
1300	1299,855	0,120	0,247	1079	77	59
1430	1429,963	0,020	0,015	11255	130	162
1484	1484,020	0,130	0,100	1164	86	59
1522	1521,703	0,030	0,032	7767	117	230
1574	1573,730	0,030	0,026	5817	100	78
1734	1734,283	0,190	0,360	720	66	136
1823	1823,093	0,130	0,094	1006	79	125
1904	1903,780	0,040	0,079	6579	111	236
1947	1946,487	0,030	0,025	6265	99	79

Результаты обработки спектров № 300, №301, №302. Положения и площади получены усреднением оценок параметров по 3 спектрам:
 σ МНК - погрешности (средние) параметров, даваемые м.н.к.-методикой;
 σ выборочное, - погрешности, полученные из дисперсий выборок параметров.

Таблица 2)

Положения	Сдвиг	Площади	Отношение
985,81	I	18151	I
987,64		56708	10
1032,27	I	33894	I
1033,69		65470	3
1076,84	I	74518	I
1078,32		81661	I
1118,34	3	5224	I
1121,34		40377	10
1404,09	3	14030	I
1407,02		38731	3
1452,06	3	36420	I
1455,00		36158	I
1789,41	6	4009	I
1795,43		38098	10
1846,47	6	18482	I
1852,27		52089	3
1927,60	6	42037	I
1933,56		40132	I

Результаты обработки спектра № 400 (разложение дублетов).

Сдвиг - истинное расстояние между пиками в дублете

Отношение - истинное отношение площадей пиков в дублете.

*Ошибки не приведены, т.к. статистические ошибки, даваемые МНК-методикой, в принципе не отражают полной неопределенности оценок параметров, особенно в сложных случаях (сдвиг = I, отношение = I/10)

Подробное описание всех команд и их данных пробито на карты и является частью пакета АСТIV'a.

Тест оодержит подгонку 3 секций избранных γ -спектров и охватывает основные режимы работы программы.

В таблицах 1 и 2 приведены результаты обработки венских тестовых γ -спектров 19/.

28.12.82
ЕЧ

В заключение автор хотел бы выразить благодарность С.А.Негреву и Х.Брухертсайферу, чье содействие и полезные советы способствовали совершенствованию программы, а также И.Александровой за адаптацию программы к ЭВМ PDP-11/70.

Литература

1. Phillips G.W., Marlow K.W. Nucl.Instr.&Meth, 137(1976)525
2. Zlokazov V.B. Comp.Phys.Commun.21(1981)373 .
3. Kotta L. Nucl.Instr.& Meth.112(1973)245 .
4. Helmer R.G., Lee M.A. Nucl.Instr.& Meth.178(1980)499 .
5. Гаджиков В. ЭЧАЯ, т.II, вып. 6, М., Атомиздат, 1980, с.1474.
6. Zlokazov V.B. Nucl.Instr.& Meth.143(1977)151 .
7. Злоказов В.Б. ОИЯИ, P10-8I-204, Дубна, 1981.
8. Zlokazov V.B. Comp.Phys.Commun.18(1979)281 .
9. Parr R.M., Houtermans H., Schaerf K. The JAEA Intercomparison of Methods for Processing Ge(Li) Gamma-Ray Spectra. American Nuclear Society Conference on Computers in Activation Analysis and Gamma-Ray Spectrometry .Mayaguez, Puerto-Rico, 1-4 May 1978.
10. Routti J.T., Prussin S.G. Nucl.Instr. & Meth., 1969, 72, p. 125 .

Рукопись поступила в издательский отдел
II февраля 1982 года.

Злоказов В.Б. ACTIV - программа автоматической обработки P10-82-105
У-спектров.

Программа ACTIV предназначена для прецизионной обработки гамма-спектров и спектров X-лучей и позволяет осуществить полный цикл автоматической обработки потоков гамма-спектров: калибровку, автоматический поиск пиков, определение положений и площадей пиков, идентификацию радиоизотопов и перевод найденных площадей в массы изотопов образца, подвергшегося облучению. Программа использует сложный математический аппарат и ориентирована преимущественно на большие и средние ЭВМ, но при использовании оверлейной загрузки может использоваться и на малых ЭВМ типа PDP-11/70. По сравнению с другими аналогичными программами, ACTIV имеет ряд преимуществ в точности описания формы пика, в надежности поиска пиков и их м.н.к.-обработки.

Программа может быть использована для целей активационного анализа.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Zlokazov V.B. ACTIV - a Program for Automatic Processing P10-82-105
of γ -ray Spectra.

The ACTIV program is intended to a precise analysis of gamma-ray and X-ray spectra and allows the user to carry out the full cycle of the automatic processing of series of spectra, i.e. the calibration, the automatic peak search, the determination of peak positions and areas, the identification of the radioisotopes and the transformation of the areas found into masses of isotopes in the irradiated sample. ACTIV uses a complicated mathematical technique and is oriented mainly to large computers, but using the overlaid loading, it can run also on small computers like PDP-11/70. Compared with other similar programs, ACTIV has some advantages in accuracy of the peak shape description and in the reliability of the peak search and its least-square analysis.

The program can be used for the purposes of the activation analysis.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computers Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.