

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

7-93

P10-86-622

А.К.Чураков, В.М.Цупко-Ситников, М.И.Фоминых

**КАТИ И LIFT - ПРОГРАММЫ ОБРАБОТКИ
СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ
НА СМ ЭВМ**

**Аппроксимация
суперпозицией асимметричных гауссианов
и сверткой суммы экспонент
с аппаратурной функцией**

1986

ВВЕДЕНИЕ

В работе /1/ был описан пакет прикладных программ AUTOP для обработки спектрометрической информации на малых ЭВМ. С учетом требований экспериментаторов за последние годы был создан ряд новых программ, позволяющих использовать малые ЭВМ для анализа результатов экспериментов в области флуоресцентного анализа, исследования радиоактивного распада, рентгеновской спектрометрии. Цель данной работы - познакомить экспериментаторов с двумя новыми программами, включенными в пакет AUTOP.

КАТ1 - ПРОГРАММА АППРОКСИМАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ СУПЕРПОЗИЦИЕЙ АСИММЕТРИЧНЫХ ГАУССИАНОВ

Задача выделения в экспериментальных данных отдельных распределений, представляющих интерес для исследователя /в частности, асимметричных гауссианов/, широко распространена в практике обработки результатов измерений. Необходимость решения подобных задач возникает при оценке параметров перекрытых линий в гамма-спектрах, выделении компонент массовых распределений осколков деления, при обработке рентгеновских спектров, а также спектров альфа- и бета-излучения.

Принципиальной трудностью при создании программ, аппроксимирующих подобные экспериментальные данные, является возможность поглощения меньших компонент за счет увеличения асимметрии больших в процессе подгонки. Эту трудность удалось преодолеть за счет использования индексного алгоритма аппроксимирующей функции /2/, позволяющего связывать варьируемые параметры различных компонент /такие как асимметрия и площадь/ или даже фиксировать их по желанию оператора.

Разработанная программа КАТ1 была предназначена для разделения компонент осколков деления, однако она может быть использована для анализа любых данных, представленных в виде суперпозиции асимметричных гауссианов и линейного фона.

Программа определяет параметры функции $F(\vec{P}, i)$, описывающей экспериментальную зависимость

$$F(\vec{P}, i) = \sum_{m=1}^{N_{\text{ПК}}} \frac{S_m^0}{\sqrt{2\pi}(\sigma_m + K_m(C_m - i))} \exp\left[-\frac{(C_m - i)}{2(\sigma_m + K_m(C_m - i))}\right] + a_1 + b, \quad /1.1/$$

где i - номер канала /точки/; \vec{P} - вектор параметров: $\vec{P} = S_1^0, C_1, \sigma_1, K_1, \dots, S_{N_{\text{ПК}}}^0, C_{N_{\text{ПК}}}, \sigma_{N_{\text{ПК}}}, K_{N_{\text{ПК}}}, a, b$; m - номер компоненты;

NPIC - число компонент; S_m^0 - площадь m -й компоненты при $K_m = 0$; C_m - положение максимума m -й компоненты; σ_m - среднее квадратичное отклонение в центре m -й компоненты; K_m - коэффициент изменения σ .

Каждая компонента представляет собой, таким образом, гауссиан с линейно меняющимся параметром σ .

Параметры функции $F(\vec{P}, i)$ определяются в результате минимизации функционала

$$S(\vec{P}; Y(i)) = \sum_{i=1}^N (Y(i) - F(\vec{P}, i))^2 \frac{1}{D(Y(i))}, \quad /1.2/$$

где $Y(i)$ - значения экспериментальной зависимости в точке i ; $D(Y(i))$ - дисперсия $Y(i)$. Предполагается, что число отсчетов в канале распределено по нормальному закону и $D(Y(i)) = Y(i)$. \vec{P}' - вектор варьируемых параметров, связанный с вектором параметров индексным вектором перехода \vec{V} , задаваемым оператором в режиме диалога:

$$P'(i) = \text{ACOFF}(m) \times P(V(j)); \quad j = 1, 2, \dots, NP, \quad /1.3/$$

где j - номер параметра, m - номер компоненты, NP - число параметров, $NP = \text{NCOMP} \times 4 + 2$, $\text{ACOFF}(m)$ - вводимый в диалоговом режиме вектор коэффициентов для связанных параметров. В простейшем случае, когда все параметры варьируются независимо, $V(j) = j$.

Если нужно задать какие-либо параметры /например, коэффициенты K_m / в качестве общего варьируемого параметра для всех пиков, то вектор \vec{V} будет иметь значение $\{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 4, \dots\}$ и т.д. В программе предусмотрена возможность задания постоянных коэффициентов для связанных параметров - $\text{ACOFF}(m)$.

Минимизация $S(\vec{P}; Y(i))$ осуществляется с помощью подпрограммы FITDEV^{4/1/}. Полученные значения площадей отдельных компонент корректируются с учетом коэффициентов асимметрии K_m .

Качество аппроксимации контролируется с помощью графиков, выводимых на экран графического дисплея, операторский дисплей или АЦПУ /см. рис.1/.

2. LIFT - ПРОГРАММА АНАЛИЗА ВРЕМЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ИССЛЕДУЕМЫХ ПРОЦЕССОВ

Анализ характеристик процессов, описываемых как интегральная свертка аппаратурной функции с суммой экспонент, представляет значительный интерес для экспериментаторов, работающих во многих областях - таких как исследования радиоактивного распада, флуоресцентный анализ, определение времени жизни уровней в ядерной спектроскопии и т.д.

Аппроксимирующая функция имеет вид

$$F(\vec{P}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(t - \tau_0 - \tau, \sigma) \left[\sum_{m=1}^{\text{NCOMP}} A_m \exp(-\lambda_m \tau) \right] d\tau + C, \quad /2.1/$$

где \vec{P} - вектор параметров $P = \{C, \tau_0, \sigma, A_1, \lambda_1, \dots, A_{\text{NCOMP}}, \lambda_{\text{NCOMP}}\}$;

τ_0 - точка, соответствующая на спектре началу процесса /см. рис.2/; σ - параметр, характеризующий ширину аппаратурной функции; m - номер экспоненты; NCOMP - число экспонент; C - уровень фона; A_m - начальная амплитуда m -й экспоненты; λ_m - параметр спада m -й компоненты: $\lambda_m = \frac{\Delta t}{T_m \cdot \ln 2}$, где Δt - цена одного кана-

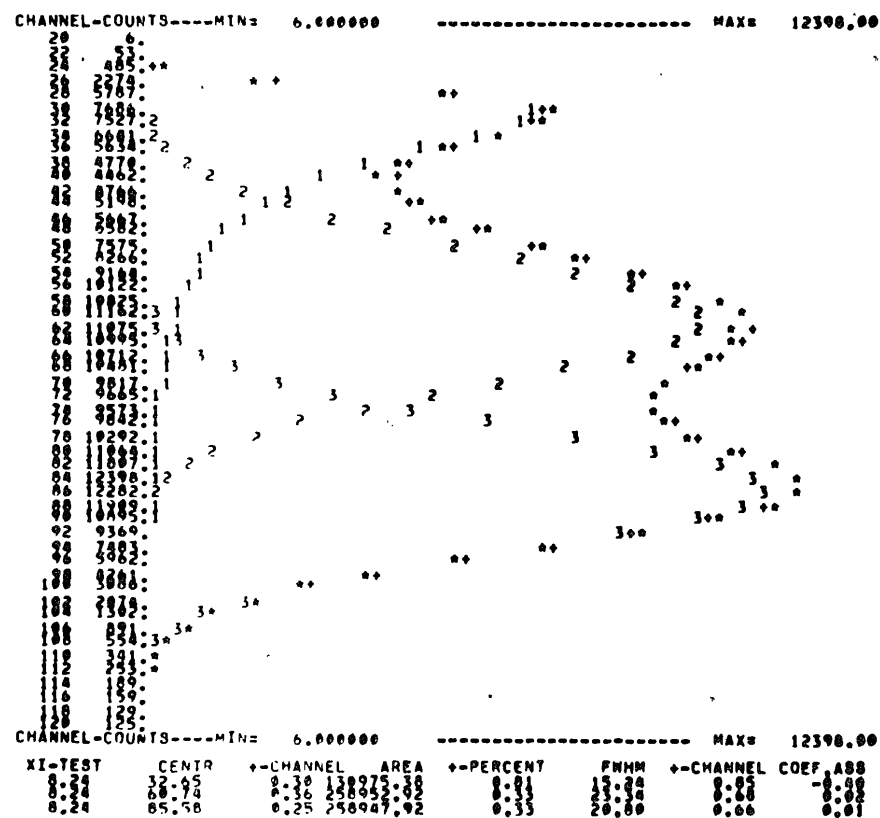


Рис.1. Результаты аппроксимации массового распределения осколков деления ^{252}Cf программой KATI. * - экспериментальный спектр; + - аппроксимирующая функция; 1,2,3 - отдельные компоненты /а-пик, пик тяжелых и легких осколков/. В соответствии с условиями экспериментов площади пиков легких и тяжелых осколков задавались как общий параметр: $V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 5, 9, 10, 11, 12, 13\}$.

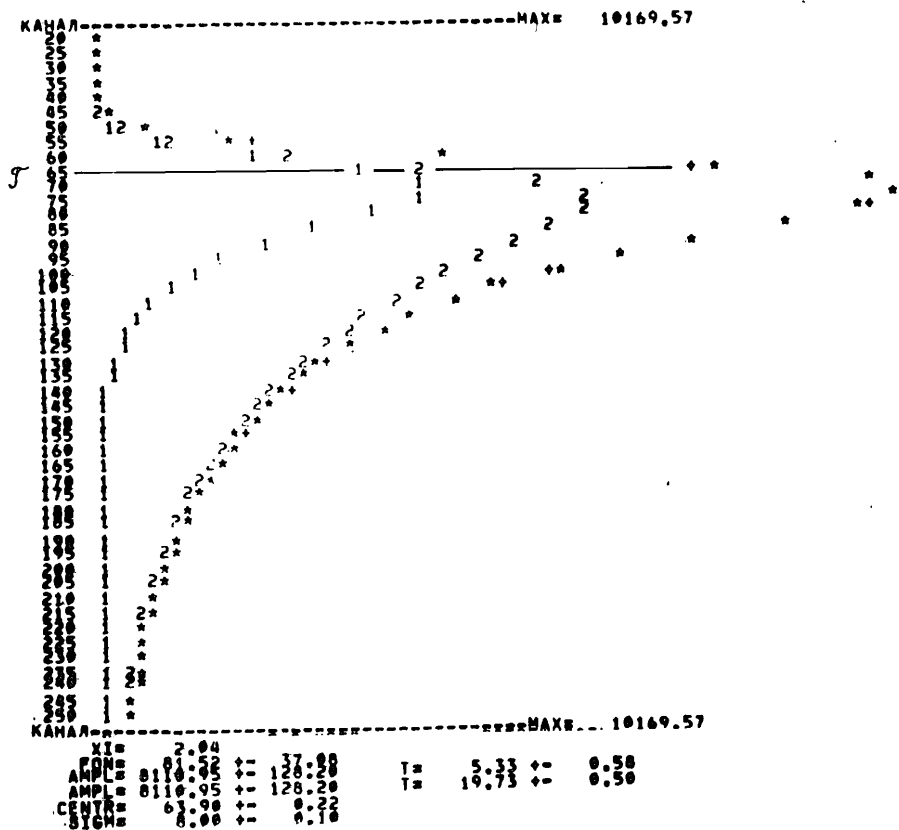


Рис.2. Результаты определения параметров экспонент и аппаратной функции программой LIFT. Исследовался спектр флуоресценции смеси антрацена / $t = 5,28$ нс/ и хининсульфата / $t = 20$ нс/. * - экспериментальный спектр; + - аппроксимирующая функция; 1,2 - компоненты аппроксимирующей функции. По условиям эксперимента концентрации равны и соответственно $A_1 = A_2$. Вектор $V = \{1, 2, 3, 4, 5, 4, 6\}$.

ла в единицах времени, T_m - период полураспада; $G(t - \tau_0 - \tau, \sigma)$ - аппаратная функция Гауссова вида

$$G(t - \tau_0 - \tau, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(t - \tau_0 - \tau)^2}{2\sigma^2}\right]. \quad /2.2/$$

Определение параметров аппаратной функции и экспонент проводится путем минимизации функционала:

$$S(\vec{P}', Y(t)) = \sum_{m=N1}^N (Y(t) - F(\vec{P}', t))^2 \frac{1}{D(Y(t))}, \quad /2.3/$$

где $Y(t)$ - значение экспериментальной зависимости в точке t ; $N1$ и N - начало и конец обрабатываемого участка; $D(Y(t))$ - дисперсия $Y(t)$, предполагается, что $D(Y(t)) = Y(t)$; \vec{P}' - вектор варьируемых параметров, связанный с вектором \vec{P}_m индексным вектором перехода \vec{V} : $P'(j) = P(V(j))$; $j = 1, 2, \dots, NP$, где NP - число параметров, $NP = 3 + NCOMP \times 2$.

Применение индексного алгоритма позволяет при наличии предварительной информации избегать неустойчивости решения, связанной с некорректностью постановки задачи разделения близких экспонент и неопределенностью в задании аппаратной функции.

Минимизация функционала /2.3/ осуществляется вариантом подпрограммы FITDEV с использованием как аналитических, так и численных значений производных по параметрам. Графики, выводимые на экран дисплея или АЦПУ /см. рис.2/, позволяют контролировать результаты аппроксимации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Описанные программы включены в пакет AUTOP и работают на ЭВМ серии СМ или Электроника-60 под управлением операционных систем РАФОС, RT11, TSX, NTS.

Авторы благодарят В.Г.Омельяненко и Е.И.Коробкину за предоставление экспериментальных материалов и ценные консультации во время работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Чураков А.К. и др. ОИЯИ, 10-83-852, Дубна, 1983.
2. Чураков А.К. и др. ОИЯИ, P11-82-459, Дубна, 1982.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 сентября 1986 года.

Чураков А.К., Цупко-Ситников В.М., Фоминых М.И.
KATI и LIFT - программы обработки спектрометрической информации на СМ ЭВМ

P10-86-622

Описываются две программы для диалоговой обработки спектрометрической информации на малых ЭВМ типа СМ. KATI - программа аппроксимации экспериментальных данных, которые могут быть представлены суперпозицией гауссианов /разделение компонент осколков деления, обработка гамма- и рентгеновских спектров, спектров альфа- и бета-излучения/. LIFT - программа анализа временных характеристик исследуемых процессов /радиоактивный распад, флуоресцентный анализ, времена жизни возбужденных уровней и др./. Аппроксимирующая функция - свертка гауссо-подобной приборной функции с суммой экспонент. Общим для обеих программ является использование специального индексного алгоритма задания аппроксимирующей функции, позволяющего связывать варьируемые параметры различных компонент или фиксировать их. Это позволяет при наличии предварительной информации избегать неустойчивость решения, связанную с поглощением меньших компонент большими за счет увеличения асимметрии последних (KATI) или трудностями разделения близких экспонент (LIFT).

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой

Churakov A.K., Tsupko-Sitnikov V.M., Fominykh M.I. .
KATI and LIFT Programs for Spectrometric Data Processing on SM Computer

P10-86-622

Two programmes for the dialogue processing of spectrometric information on SM-type mini-computers are described. KATI is a programme for approximation of experimental data which can be presented by a superposition of asymmetric Gaussians (separation of components of fission fragments, analysis of gamma and X-ray spectra, α - and β -radiation spectra). LIFT is a programme for analysis of time characteristics of processes under investigation (radioactive decay, fluorescent analysis, lifetimes of excited levels, etc.). The approximating function is a convolution of a Gaussian-like instrumental function with the sum of exponentials. The common feature for two programmes is the use of a special index algorithm for assignment of the approximating function. It allows binding or fixing parameters of different components. Thus, if there is preliminary information, one can avoid solution instability caused by absorption of smaller components by larger ones due to increase in asymmetry of larger components or difficulty in separation of close exponentials (LIFT).

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986