

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



С.344.1ш
П-955

12/1-76
P10 - 9242

К.Пырвулеску

104/2-76

ЭКСПРЕСС-ОБРАБОТКА СПЕКТРОВ
НА МАЛОЙ ЭВМ, ИСПОЛЬЗУЕМОЙ НА ЛИНИИ
С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ УСТАНОВКОЙ

1975

P10 - 9242

К.Пырвулеску

ЭКСПРЕСС-ОБРАБОТКА СПЕКТРОВ
НА МАЛОЙ ЭВМ, ИСПОЛЬЗУЕМОЙ НА ЛИНИИ
С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ УСТАНОВКОЙ

Областная библиотека
Ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа рассматривает проблему экспресс-обработки экспериментальных спектров.

В нижеизложенном под спектром будем понимать множество точек

$$Y = \{(i, y_i), \quad i = 1, \dots, n; \quad y_i \in N\},$$

которое обычно представляется графически так, как на рис. 1а.

Максимумы спектра называют пиками, а участки вне пиков - фоном спектра. Эти сигналы накладываются на статистические флуктуации шума. Таким образом, спектр можно представить в виде суммы:

$$y_i = p_i + f_i + z_i, \quad /1/$$

где p_i - вклад пика, f_i - вклад фона, а z_i - вклад шума.

Целью настоящей работы является идентификация пиков и определение их характеристик /боковые границы, центр тяжести, площадь и полная ширина на полувысоте/ /будем впоследствии называть это анализом структуры спектра/.

Из множества существующих методов /1-6/ для обработки в real time надо выбирать те, которые определяют структуру спектра за минимальное время и не требуют больших участков памяти вычислительной машины.

Имея в виду, что $y_i \in \mathbb{N}$, рассмотрим метод обработки, который использует только операции с целыми числами, чтобы сократить до минимума время вычисления на машине. При этом попытаемся поддерживать приемлемый уровень погрешности, во всяком случае ниже уровня погрешности визуальных методов.

Разработанная программа предназначена для вычислительной машины HP - 2116B.

Оценку погрешности можно осуществить затем в режиме off-line.

Результаты нижеописанной программы могут быть использованы как исходные точки /первые приближения/ для обработки off-line, что обеспечивает большую вероятность сходимости итеративных процессов, сокращение времени счета вычислительной машины и высокую точность вычислений.

Программа может указать, при необходимости, на появление пиков с мультиплетной структурой, не разделяя их при этом на компоненты. Эту информацию можно использовать при вычислении в режиме off-line.

2. ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМА ОБРАБОТКИ

Анализ структуры спектра производится в следующей последовательности:

- идентификация пиков;
- выделение области каждого пика;
- определение характеристик пика: центр тяжести, площадь, полная ширина на полувысоте;
- вывод результатов в печатном виде.

2.1. Идентификация пиков

Идентификация пиков производится применением к экспериментальному спектру Y логического оператора:

$$\hat{O}(Y) = \Omega, \quad /2/$$

где $\Omega \neq 0$ - в зоне пика, $\Omega = 0$ - вне зоны пика.

Такой вид оператора можно получить следующим образом. $\hat{O}(Y) = \Omega \neq 0$ для положительных величин функции корреляции /4/:

$$C(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} (2T)^{-1} \int_{-T}^T p(t) y(t+\tau) dt, \quad /3/$$

где $p(t)$ - функция, которая описывает форму пика, а $y(t)$ - анализируемый спектр. Иначе, $\hat{O}(Y) = \Omega = 0$.

Формула /3/, годная для пространств непрерывных функций, в случае дискретных распределений принимает вид:

$$C(m) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} p_i y_{i+m}. \quad /4/$$

Так как практически $p_i \neq 0$ только в ограниченной области $[-k, k]$, выражение /4/ примет вид:

$$C(m) = \sum_{i=-k}^k p_i y_{i+m}. \quad /5/$$

Теоретически p имеет вид гауссовой кривой:

$$p(t) = a \exp\left(-\frac{t^2}{b^2}\right), \quad /6/$$

которую можно аппроксимировать для вычислений /5/ симметричным прямоугольным распределением p'_i :

$$p'_i = p'_{-i} \quad i \in [-k, k], \quad i \neq \{0\}. \quad /7/$$

В этом случае выражение /5/ принимает вид:

$$C(m) = \sum_{i=-k}^k p'_i y_{i+m}. \quad /5'/$$

Пренебрегая для начала шумами z_i и считая фон постоянным

$$f_i = d, \quad /8/$$

получаем следующее выражение:

$$C(m) = \sum_{i=-k}^k p'_i p_{i+m} + d \sum_{i=-k}^k p'_i \quad /9/$$

Из требования /2/, которому должен удовлетворять оператор \hat{O} , следует, что

$$\sum_{i=-k}^k p'_i = 0. \quad /10/$$

В данном случае очевидно, что и для линейного фона, или, в общем, для антисимметричного по отношению к горизонтали фона, оператор \hat{O} удовлетворяет условию /2/.

Чтобы избежать умножений, которые расходуют значительное время вычислительной машины, выбираются p'_i в виде наименьших целых чисел, удовлетворяющих одновременно условиям /7/ и /10/. Например, для $k=4$ можно выбрать

$$\begin{aligned} p'_i &= 2 & \text{для } i \in [-1, 1] \\ p'_i &= -1 & \text{для } i \in [-4, -2] \cup [2, 4]. \end{aligned} \quad /11/$$

Умножение на два, которое встречается в этом случае в выражении /5'/, переходит в двойное суммирование.

В случае учета шумов, чтобы не принимать за пики положительные значения шума, устанавливается порог g , который равен или больше максимального значения шума. Участки, где

$$C(m) > g, \quad /12/$$

соответствуют реальным пикам.

Хорошие результаты получаются, если k приблизительно равно ширине пика.

Следует подчеркнуть, что величины $C(m)$ не надо хранить в памяти вычислительной машины. Первая величина m , для которой выполняется условие /12/, представляет собой левую границу ℓ_s^j пика j , а последняя величина m из зоны пика j , которая еще выполняет

условие /12/, представляет собой правую границу ℓ_d^j пика j .

2.2. Определение положения пика и оценка фона

Зона пика, определенная в 2.1, меньше своей действительной ширины. Для более точного определения границ пика, в случае малых статистических флуктуаций, используется следующий подход /6/. Около ℓ_s^j определяется минимальная величина y_i . Величина i , соответствующая этому минимуму, представляет собой левую границу пика L_s^j . Аналогичным образом получается L_d^j - правая граница пика. Поскольку в общем пик распределяется на малом числе каналов, фон можно аппроксимировать прямой линией, которая соединяет точки $(L_s^j, y(L_s^j))$ и $(L_d^j, y(L_d^j))$. Параметры этой прямой определяются с помощью метода наименьших квадратов. Берутся точки с обеих сторон граничных точек и определяется линия, которая проходит через данные 6 точек: /7/

$$f = u_i + v \quad /13/$$

$$u = \frac{\sum i^2 \sum y_i - \sum i \sum i y_i}{N \sum i^2 - (\sum i)^2} \quad /14/$$

$$v = \frac{N \sum i y_i - \sum i \sum y_i}{6 \sum i^2 - (\sum i)^2}, \quad /15/$$

где суммирование производится от 1 до N , а $N=6$.

Результаты умножений и делений аппроксимируются ближайшими целыми числами, как в /7/.

Таким образом, параметры линии выражаются также целыми числами. Вычитанием

$$y'_i = y_i - f(i) \quad /16/$$

получается спектр без фона, который будет использован ниже.

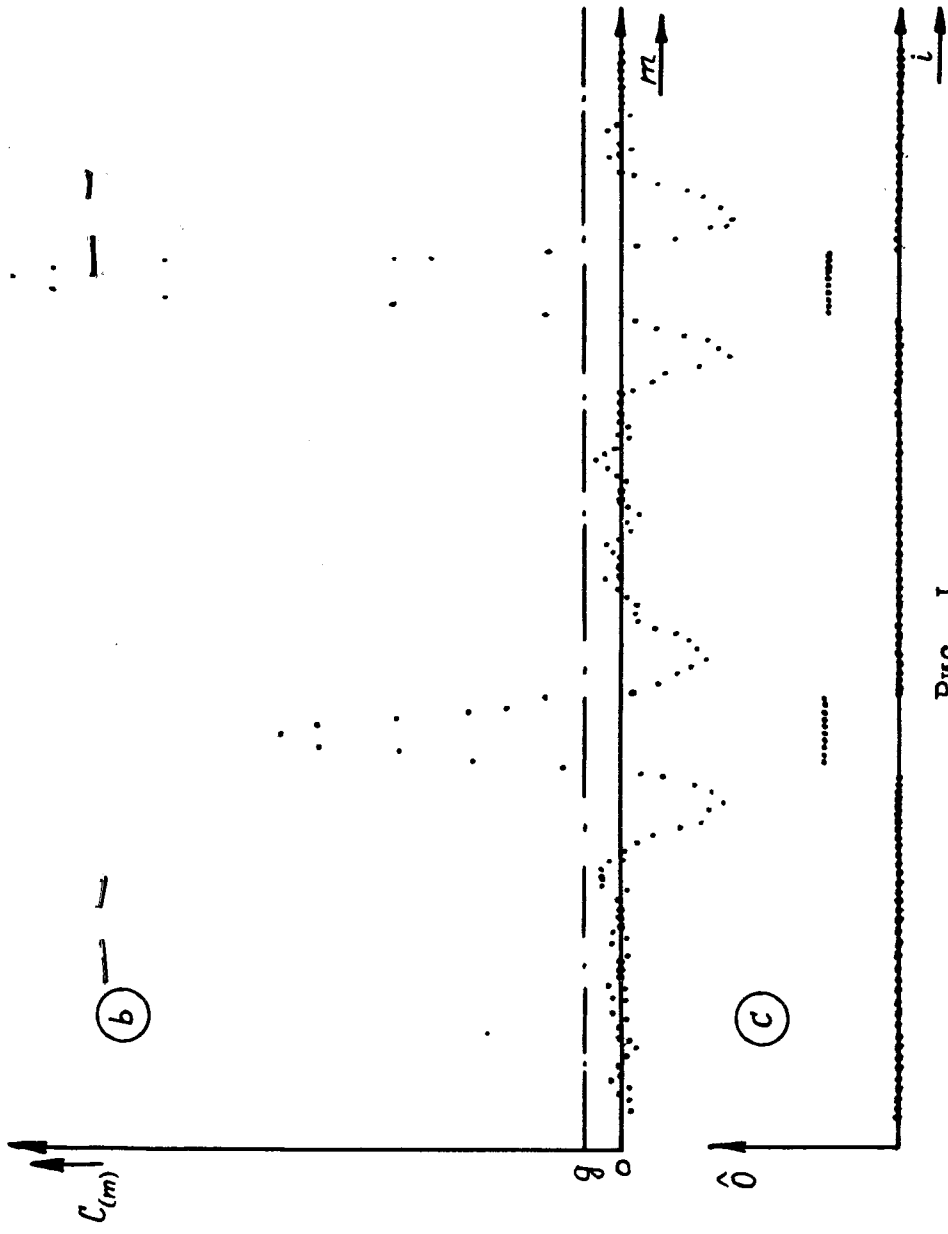
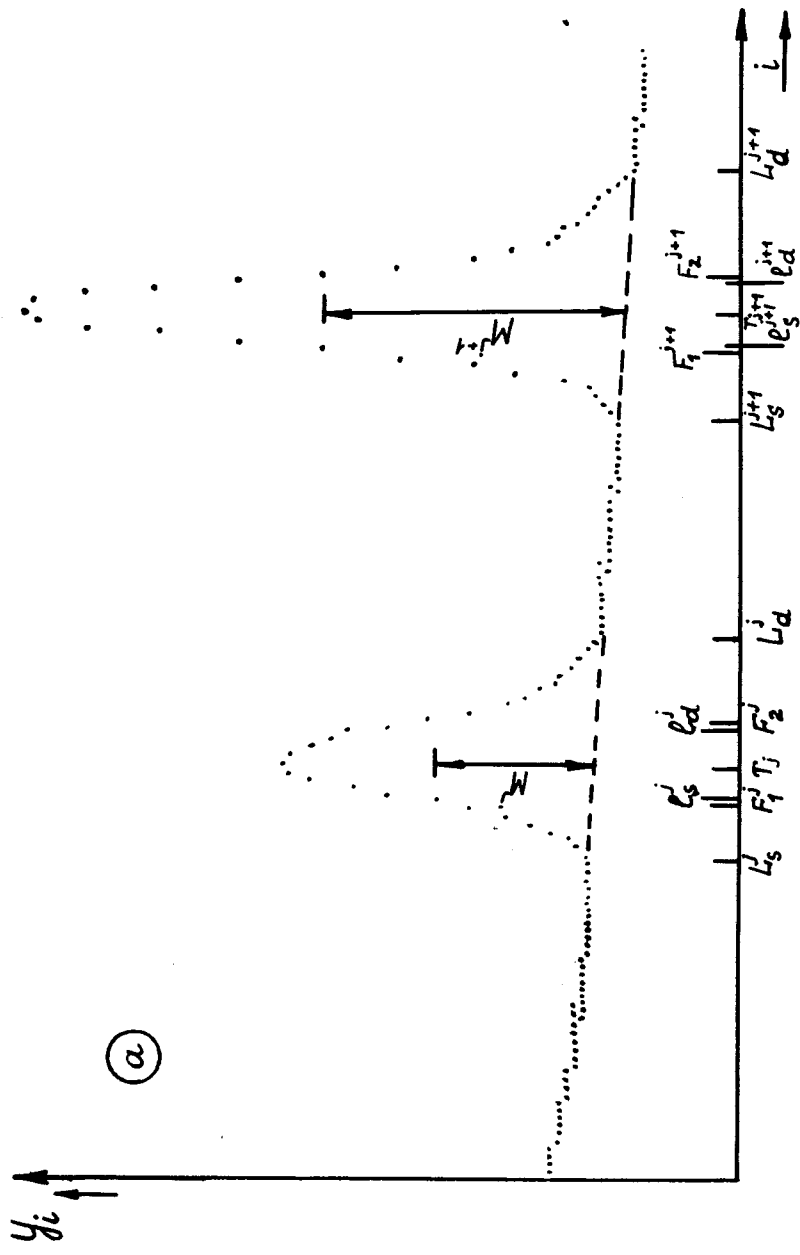


Рис. 1.

2.3. Определение характеристик пика

Во избежание лишней загрузки памяти вычислительной машины величинами y'_i определение площади и центра пика осуществляется одновременно с помощью формул:

$$A_j = \sum_{i=L_s^j}^{L_d^j} y'_i \quad /17/$$

$$T_j = \frac{1}{A_j} \sum_{i=L_s^j}^{L_d^j} i y'_i \quad /18/$$

Полная ширина на полувысоте /п.ш.н.п.в./ вычисляется в соответствии с определением. С этой целью пишем:

$$y'(T_j) = y(T_j) - f(T_j) \quad /19/$$

и берем

$$M^j = \frac{1}{2} Y'(T_j) \quad /20/$$

После этого анализируются точки левее от T_j /от T_j к L_s^j / и выбирается та точка, для которой выполняется условие:

$$y'_i \leq M^j \quad /21/$$

Обозначаем:

$$F_1^j = i, \quad \text{если} \quad y'_i = M^j; \quad /22/$$

$$F_1^j = i+1, \quad \text{если} \quad y'_i < M^j.$$

Затем анализируются точки справа от T_j /от T_j к L_d^j / и выбирается та точка, для которой выполняется условие /21/. Обозначаем:

$$F_2^j = i. \quad /23/$$

Величина

$$F^j = F_2^j - F_1^j \quad /24/$$

представляет собой искомое значение.

Такое определение п.ш.н.п.в. сравнивается с предварительной оценкой F_0 , внесенной в виде начальных данных в вычислительную машину. Если

$$F^j > F_0, \quad /25/$$

то пик j следует считать мультиплетом и выводить соответственно на печатающем устройстве.

3. ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ

Программа PRLSP, составленная в соответствии с вышеизложенным, написана на автокоде вычислительной машины HP -2116B.

Она состоит из нескольких подпрограмм. Входная подпрограмма INTSP снабжает программу полной шириной спектра /назначает буфер, в котором находится исследуемый спектр/, указывается ширина коррелятора p' и максимальное значение п.ш.н.п.в. для синглетов.

Подпрограмма SEARC идентифицирует пики на основе значений функции корреляции. Функция корреляции вычисляется только для точек

$$m \in [k+1, n-k]. \quad /26/$$

Подпрограмма DELIM устанавливает левую и правую границы пика.

Подпрограмма FOUND определяет параметры прямой линии, описывающей фон в зоне пика.

Подпрограмма ANALP определяет площадь и центр пика.

Подпрограмма FWHM определяет п.ш.н.п.в.

Выходная подпрограмма печатает на цифропечатающем устройстве число пиков, положение каждого пика, площадь центроид, п.ш.н.п.в. и пики, которые могут представлять собой мультиплеты.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вышеизложенная программа предназначена для анализа структуры спектров на вычислительных машинах on-line, работающих в real time. Она была использована на HP -2116B и без больших изменений может быть применена на любой вычислительной машине.

Программа задумана для работы с целыми числами, а математический метод был выбран таким образом, чтобы использовать в основном лишь сложения и вычитания. В случае появления умножений и делений результаты этих вычислений были аппроксимированы ближайшими целыми числами. Таким образом, время вычисления было сведено к минимуму.

При составлении программы мы стремились освободить память от лишних загрузок, ориентируя алгоритм обработки на использование промежуточных результатов по мере их получения.

Обработка в real time ведет к удовлетворительной точности в случае хорошей статистики и для спектров, содержащих только синглеты.

Хотя данная программа уступает по точности /из-за ограничений работы с целыми числами/ другим, более сложным, программам /2,3/, ее главным преимуществом является возможность получения структуры спектра во время проведения эксперимента или в период калибровки и испытания аппаратуры.

Полученные данные могут быть приняты в качестве начальных данных для последующих итеративных, более точных обработок на мощных вычислительных машинах off-line.

В ближайшем будущем предусматривается составление на основе этой простой программы системы программ с добавлением ряда подпрограмм с фиксированной запятой, способной обрабатывать спектр с лучшей точностью и бо-

лее широко на той же самой вычислительной машине.

Автор хотел бы выразить свою глубокую благодарность А.Е.Сеннеру за помощь в работе с HP -2116B, Н.Вылкову и И.М.Иванченко за интерес к работе и полезные обсуждения.

Литература

1. Н.Г.Волков. Методы анализа линейчатых гамма-спектров, полученных с помощью полупроводниковых детекторов. М., МИФИ, 1975.
2. С.Аврамов и др. ОИЯИ. 10-6467, Дубна, 1972.
3. M.A.Mariscotti. Nucl. Instr. and Meth., 50, 309 (1967).
4. W.W.Black. Nucl. Instr. and Meth., 71, 317 (1969).
5. A.Robertson, W.V.Prestwich, V.I.Nesterov. Nucl. Instr. and Meth., 100, 317 (1972).
6. I.A.Slavic, S.B.Bingulac. Nucl.Instr. and Meth., 84, 261 (1970).
7. P.R.Bevington. Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences, N.Y., McGraw Hill, 1969.

Рукопись поступила в издательский отдел
23 октября 1975 года.