



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

96-184

P10-96-184

К.И.Грицай, В.Ю.Помякушин

ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ μ SR-СПЕКТРОВ MuonFit

1996

Введение

Стандартной задачей, возникающей при анализе результатов физических экспериментов, является приближение экспериментальных данных модельными теоретическими функциями, содержащими подгоночные параметры. В настоящей работе описывается программа обработки временных гистограмм, получаемых в μ SR (Muon Spin Rotation) экспериментах [1].

μ SR-гистограмма является гистограммой временных интервалов между моментом остановки мюона в мишени и моментом его распада и содержит, как правило, 2–8 тысяч каналов (рис. 1). Гистограмма описывается функцией вида

$$BG + N e^{-\frac{t}{\tau_\mu}} (1 + P(t)),$$

где τ_μ — время жизни мюона, BG — фон. Значимая физическая информация содержится в функции $P(t)$, которую называют функцией поляризации. Вид функции поляризации, определяемый механизмом взаимодействия мюона в веществе и условиями проведения эксперимента, может быть достаточно сложным, но, задавая уравнения связи между подгоночными параметрами, функцию $P(t)$ можно записать в виде суммы независимых слагаемых, каждое из которых будет выбираться из ограниченного набора возможных вариантов.

В случае использования отрицательных мюонов в функцию, описывающую μ SR-гистограмму, входят несколько компонентов

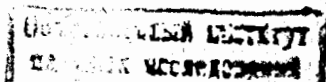
$$N_i e^{-\frac{t}{\tau_i}} (1 + P_i(t)),$$

соответствующих разным скоростям ядерного захвата мюона разными ядрами.

Обычно в μ SR-эксперименте набирается несколько (2–5) гистограмм одновременно, которые называют μ SR-спектром. Параметры, описывающие взаимодействие мюона в веществе, в большинстве случаев являются общими для всех гистограмм спектра. Совместная обработка гистограмм спектра с обобщением части параметров приводит к повышению точности определения параметров. В случае сильной корреляции между параметрами совместная обработка может давать выигрыш в точности определения параметров в несколько раз по сравнению с отдельной обработкой и последующим усреднением.

В настоящее время имеется большое количество библиотек и готовых программных продуктов, позволяющих проводить обработку экспериментальных данных, но в силу упомянутых специфических требований для обработки μ SR-данных обычно разрабатываются специальные программные продукты. В описываемой программе реализован набор возможностей, необходимых при анализе μ SR-данных: совместная обработка нескольких гистограмм, задание линейных уравнений связи между подгоночными параметрами, простой способ формирования фитируемой модельной функции, пакетная обработка набора спектров и визуальный контроль результатов обработки.

Программа *MuonFit* ориентирована прежде всего на интерактивную работу и имеет простой и удобный пользовательский интерфейс, основу которого составляет система меню.



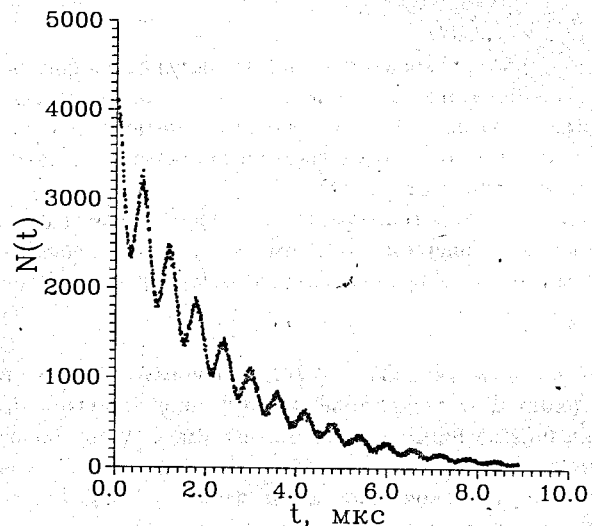


Рис. 1. μ SR-гистограмма $N(t)$ (Cu, $H = 100$ Гс, $T = 270$ К)

Формат входных данных

Входными данными для программы *MuonFit* являются μ SR-спектры. Спектры хранятся в виде бинарных файлов, каждый спектр — в отдельном файле. Спектр состоит из паспорта и нескольких (до 8) гистограмм. Гистограмма записывается как массив целых беззнаковых чисел. Длина гистограммы и размер канала гистограммы указываются в паспорте спектра. В настоящее время программа *MuonFit* может работать с гистограммами длиной до 8192 каналов с размером канала 2; 4 и 8 байт. В паспорте спектра содержится информация о температуре исследуемого образца, величине и направлении магнитного поля на образце, номере канала гистограммы, соответствующего нулю времени, цене канала гистограммы, комментариях и некоторая дополнительная информация. Все числовые значения записываются в целочисленном формате, что улучшает переносимость файлов данных между различными операционными системами.

Формат файла данных допускает преобразование в него μ SR-спектров, записанных на мезонной фабрике PSI (Швейцария). Для выполнения такого преобразования написана программа-конвертор.

Адресация спектра осуществляется по его номеру, который одновременно является частью имени файла.

Подготовка к фитированию

Подготовка к фитированию состоит из следующих шагов:

- Из μ SR-гистограммы удаляются “выбитые” каналы, $(i + 1)$ -й канал считается “выбитым”, если выполняется условие

$$\frac{(y_i - y_{i+1})^2}{y_i} \geq \sigma^2,$$

где y_i — число событий в i -м канале гистограммы.

- Гистограмма поканально суммируется. Необходимость такого суммирования возникает в случае малой статистики (< 10 событий) в канале гистограммы.
- В соответствии с заданными выражениями вычисляются начальные значения подгоночных параметров, при этом может быть использована информация, содержащаяся в паспорте спектра. В выражениях допускается использование арифметических операций (+, -, *, /) и следующих идентификаторов:

- T — температуры;
- DeltaT — среднеквадратичного отклонения температуры;
- Hx — x-составляющей магнитного поля;
- Hy — y-составляющей магнитного поля;
- Hz — z-составляющей магнитного поля;
- Ht — составляющей магнитного поля, перпендикулярной начальной поляризации мюонного пучка ($Ht = \sqrt{Hx^2 + Hy^2}$);
- Hl — составляющей магнитного поля, продольной по отношению к начальной поляризации мюонного пучка ($Hl = Hz$);
- H — магнитного поля ($H = \sqrt{Hx^2 + Hy^2 + Hz^2}$);
- M — монитора (число остановок мюонов в мишени);
- M1 — монитора #1 (не специфицирован);
- Gamma — гиромагнитного отношения для мюона ($Gamma = 0.08515865$ рад/(Гс · мкс));
- Tau — времени жизни мюона ($Tau = 2.19714$ мкс);
- Pi — числа π .

Например, выражение $Gamma * H$ можно использовать для задания начального значения частоты прецессии спина мюона.

- По гистограмме и модельной функции определяются начальные значения фона BG и нормировочного множителя N (для модельных функций, представимых в виде $BG + NF(t)$).

Алгоритм минимизации

Подгоночные параметры \mathbf{a} модельной функции $f(t, \mathbf{a})$ определяются путем минимизации функционала

$$\chi^2(\mathbf{a}) = \sum_k \frac{(y_k - f_k(\mathbf{a}))^2}{y_k},$$

где y_k — экспериментальные точки, f_k — соответствующие значения модельной функции. В программе *MuonFit* использован алгоритм Маркварта минимизации функции многих переменных [2]. Этот алгоритм характерен тем, что сочетает в себе методы линеаризации и градиентного спуска. Минимизация выполняется следующим образом.

Теоретическая функция линеаризуется в некоторой точке

$$f_k(\mathbf{a}) \approx f_k(\mathbf{a}_0) + \sum_i \frac{\partial f_k(\mathbf{a}_0)}{\partial a_i} \Delta a_i$$

и подставляется в функционал. Составляется система уравнений относительно параметров

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_i} = 0,$$

или в матричной записи

$$\sum_j G_{ij} \Delta a_j = Y_i,$$

где

$$G_{ij} = \sum_k \frac{1}{y_k} \frac{\partial f_k}{\partial a_i} \frac{\partial f_k}{\partial a_j}, \quad Y_i = \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial a_i} \frac{(y_k - f_k)}{y_k}.$$

Затем над матрицей G_{ij} выполняется следующее преобразование:

$$G_{ij} \rightarrow \frac{G_{ij}}{\sqrt{G_{ii}G_{jj}}}, \quad G_{ij} \rightarrow G_{ij} + U\delta_{ij},$$

где U — некоторый неотрицательный параметр. Находится матрица G_{ij}^{-1} , обратная к G_{ij} , и выполняется преобразование

$$G_{ij}^{-1} \rightarrow \frac{G_{ij}^{-1}}{\sqrt{G_{ii}G_{jj}}}$$

Шаг изменения вектора \mathbf{a} вычисляется как сумма:

$$\Delta a_i = \sum_j G_{ij}^{-1} Y_j.$$

Ситуация, когда добавка U к диагональным элементам матрицы G_{ij} равна 0, эквивалентна методу линеаризации, увеличение параметра U приводит к повороту

вектора $\Delta \mathbf{a}$ в направлении $-\text{grad} \chi^2$ и уменьшению его модуля. Диагональные элементы матрицы G_{ij}^{-1} при $U = 0$ дают ошибки параметров

$$\delta a_i = \sqrt{G_{ii}^{-1}}.$$

После вычисления новых значений параметров \mathbf{a} проверяется полученное значение χ^2 . Если шаг был удачен, т.е. χ^2 уменьшился, то величина U уменьшается, если нет — увеличивается и процедура фитирования возобновляется из точки, соответствующей лучшему значению χ^2 .

Процесс минимизации останавливается, когда уменьшение χ^2 за одну итерацию становится меньше заданной величины или при достижении указанного числа итераций. На последнем шаге, для получения правильных значений ошибок параметров, величина U полагается равной 0.

Данный алгоритм минимизации уже около 10 лет применяется при обработке μSR -данных. За это время он был протестирован с большим количеством модельных функций и для большинства из них показал хорошую сходимость и устойчивость.

Способ варьирования параметра

При выполнении минимизации функционала χ^2 любой подгоночный параметр a_i может быть

- фиксированным;
- свободно варьируемым;
- варьируемым в заданных границах.

Варьирование параметра в заданных границах осуществляется посредством замены переменной:

$$a_i = p_i \sin(b_i) + q_i.$$

При этом ошибки пересчитываются в линейном приближении:

$$\delta a_i = |p_i \cos(b_i)| \delta b_i,$$

которое применимо, только когда значение параметра находится далеко от заданных границ.

В процессе выполнения минимизации функционала χ^2 программа *MuonFit* позволяет “вручную” изменять значения подгоночных параметров, фиксировать и освобождать параметры, изменять границы варьирования параметров.

Уравнения связи между параметрами

На подгоночные параметры могут быть наложены дополнительные ограничения в виде системы линейных уравнений. В уравнениях допускается использование арифметических операций (+, -, *, /), параметры должны находиться в числителях дробей. Параметры обозначаются как $a_N:N$, где N — номер параметра и N — номер фитируемой гистограммы, к которой параметр относится, например:

- $a5:1=a5:2$;
- $a3:1+a7:1=0.15$,
 $a3:2+a7:2=0.09$.

Для упрощения введения набора уравнений, отличающихся только номерами гистограмм, предусмотрена возможность указания параметра без номера гистограммы. Уравнение, содержащее такой параметр, будет преобразовано в несколько уравнений, в которых опущенный номер гистограммы пробежит все возможные значения, например:

- для трех обрабатываемых гистограмм

$$a9=0.5*a5 \equiv \begin{cases} a9:1=0.5*a5:1, \\ a9:2=0.5*a5:2, \\ a9:3=0.5*a5:3; \end{cases}$$
- для четырех обрабатываемых гистограмм

$$a5:1=a5 \equiv \begin{cases} a5:1=a5:2, \\ a5:1=a5:3, \\ a5:1=a5:4. \end{cases}$$

В результате решения заданной системы уравнений подгоночные параметры a модельной функции выражаются через внутренние независимые параметры b :

$$a_i = \sum_j C_{ij} b_j + D_i.$$

При этом ошибки параметров вычисляются в следующем приближении:

$$\delta a_i = \sqrt{\sum_j (C_{ij} \delta b_j)^2}.$$

Модельные теоретические функции

Выбор модельной теоретической функции для обработки гистограммы осуществляется путем указания ключа обработки. Ключ обработки представляет собой строку, которая состоит из двух полей: первое — определяет общий вид фитируемой функции, второе — тип элементов фитируемой функции.

Не перечисляя всех возможных вариантов фитируемой функции, приведем только две наиболее универсальные модельные функции:

$$BG + Ne^{-\frac{t}{\tau}} \left(1 + \sum_i P_i(t) \right) + N \sum_i b_i \cos(\omega_i t + \varphi_i);$$

$$BG + \sum_i N_i e^{-\frac{t}{\tau_i}} (1 + P_i(t)) + \sum_i b_i \cos(\omega_i t + \varphi_i).$$

Эти функции предназначены для обработки μ^+SR и μ^-SR -спектров соответственно и могут содержать произвольное число элементов, ограниченное только возможным количеством подгоночных параметров.

Слагаемые типа $b \cos(\omega t + \varphi)$ используются для описания временной структуры мюонного пучка и фактически являются зависящей от времени частью фона.

Набор возможных слагаемых $P_i(t)$ функции поляризации включает в себя (индекс i у параметров опущен)

- a ;
- $a \exp(-\lambda t) \Phi(t)$;
- $a \exp(-(\sigma t)^2) \Phi(t)$;
- $a \left(\frac{1}{3} + \frac{2}{3}(1 - (\sigma t)^2) \exp\left(-\frac{(\sigma t)^2}{2}\right) \right) \Phi(t)$;
- $a \exp(-(\sigma t)^\delta) \Phi(t)$;
- $a \left(\frac{1}{3} + \frac{2}{3}(1 - \lambda t) \exp(-\lambda t) \right) \Phi(t)$;
- $a \exp\left(-\frac{2\sigma^2}{\lambda^2} (\exp(-\lambda t) - 1 + \lambda t)\right) \Phi(t)$;
- $a \exp(-(\sigma t)^2) \exp(-\lambda t) \Phi(t)$;
- $a \left(\frac{1}{3} + \frac{2}{3}(1 - (\sigma t)^2) \exp\left(-\frac{(\sigma t)^2}{2}\right) \right) \exp(-\lambda t) \Phi(t)$;
- $a \left(\frac{1}{3} + \frac{2}{3} \exp\left(-\frac{(\sigma t)^2}{2}\right) \left(\cos(\omega t + \varphi) - \frac{\sigma^2 t}{\omega} \sin(\omega t + \varphi) \right) \right)$,

где

$$\Phi(t) = \begin{cases} \cos(\omega t + \varphi) \\ J_0(\omega t + \varphi) \end{cases}$$

Каждый элемент модельной функции использует свое, непересекающееся с другими элементами, подмножество подгоночных параметров. Когда требуется обобщить некоторый параметр на несколько элементов, необходимо использовать уравнения связи между параметрами.

Хотя добавление новой модельной функции в программу *MuonFit* требует модификации кода и перетрансляции программы, сделать это относительно несложно, поскольку все изменения будут локализованы в одном программном модуле.

Способы обработки

Программа *MuonFit* поддерживает несколько способов формирования набора обрабатываемых гистограмм и вызова процедуры фитирования.

- Процедура "Fit" выполняет фитирование заданных гистограмм, принадлежащих одному спектру.
- Процедура "Batch" выполняет последовательный вызов процедуры "Fit" по заданному списку обрабатываемых спектров.
- Процедура "Sum fit" выполняет фитирование набора гистограмм, который получается путем погистограммного суммирования всех спектров, перечисленных в списке для обработки.
- Процедура "Combine" выполняет фитирование набора гистограмм, который формируется из гистограмм всех спектров, перечисленных в списке для обработки.
- Процедура "Fit again" возобновляет фитирование набора гистограмм, подготовленного предыдущим вызовом процедуры "Fit", "Batch", "Sum fit" или "Combine". При этом не выполняются действия, описанные в секции "Подготовка к фитированию".

Если процедуре фитирования передается для обработки более одной гистограммы, то выполняется совместная обработка всех гистограмм, при этом каждая гистограмма описывается своим независимым набором подгоночных параметров. При необходимости обобщить некоторый параметр на несколько фитируемых гистограмм нужно использовать уравнения связи между параметрами.

Процедура фитирования позволяет последовательно обработать подготовленный набор гистограмм несколькими функциями фитирования (до 4) с разным числом обрабатываемых каналов (до 2 вариантов).

Контроль результатов обработки

Заключение о соответствии модельной функции экспериментальным данным и о правильности определения подгоночных параметров делается на основе сравнения полученного значения χ^2 с величиной квантиля $\chi^2_p(m)$ распределения $\chi^2(m)$, а также путем визуального контроля следующих зависимостей: экспериментальной и теоретической функций поляризации (рис. 2), отклонения экспериментальной функции поляризации от теоретической функции поляризации, величины

$$u_k = \frac{y_k - f_k}{\sqrt{y_k}}$$

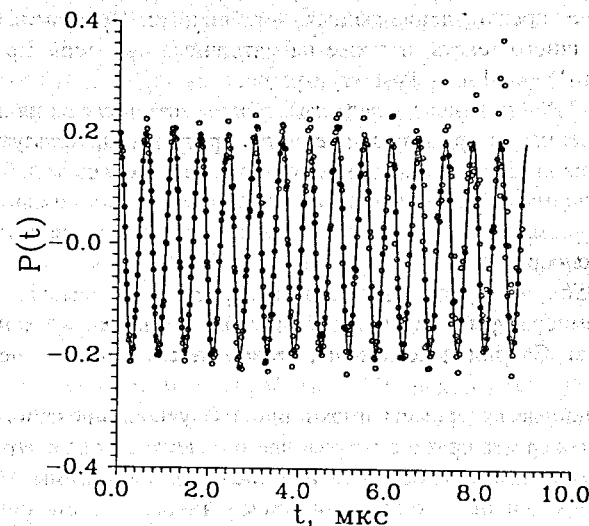


Рис. 2. Экспериментальная и теоретическая функции поляризации $P(t)$

Под экспериментальной функцией поляризации понимается

$$P_k^{\text{exp}} = \frac{y_k - BG}{N e^{-\frac{t}{\tau}}},$$

где значения BG , N и τ берутся из теоретической зависимости. Здесь $BG = BG(t)$ включает в себя в том числе и зависящую от времени часть фона.

В случае фитирования данных модельной функцией, содержащей несколько компонентов

$$N_i e^{-\frac{t}{\tau_i}} (1 + P_i(t)),$$

требуется указать, параметры какого компонента должны использоваться при построении зависимостей, при этом остальные компоненты модельной функции будут рассматриваться как часть фона BG .

Формат выходных данных

Найденные в результате фитирования значения подгоночных параметров, полученное значение χ^2 , ключ обработки, номера спектра и гистограммы, некоторая дополнительная информация о спектре и обработке записываются в файл результатов. Формат файла результатов — бинарный. Для работы с файлом результатов написан набор утилит, основные из которых — *ListPar*, *APiPlot* и *GShowPar*.

Программа *ListPar* предназначена для просмотра и вывода на печать результатов обработки. Формат представления данных — табличный. Программа поддерживает вывод в виде обычного текста, а также на матричные принтеры Epson, лазерные принтеры Hewlett-Packard и на PostScript-устройства.

Программа *APtPlot* позволяет осуществлять просмотр и вывод на печать зависимостей, перечисленных в предыдущей секции. Программа использует для построения графиков пакет *Gnuplot*, который поддерживает большой набор принтеров и графических форматов. Утилита *APtPlot* позволяет также создавать мета-файл для работы с пакетом *Grapher* и, таким образом, получать рисунки, пригодные для использования непосредственно в статьях.

Программа *GShowPar* предназначена для построения зависимостей подгоночных параметров от температуры и величины магнитного поля. Как и в утилите *APtPlot*, использован пакет *Gnuplot* и реализована возможность создания мета-файла для пакета *Grapher*.

Все перечисленные программы имеют простой унифицированный интерфейс. Каждая утилита содержит краткое встроенное описание ее параметров и формата их задания. Настраиваемые параметры (в том числе для программы *MuonFit*) могут быть заданы или в командной строке, или путем установки переменной окружения, одноименной соответствующей программе.

Эффективность программы

Использованный алгоритм минимизации χ^2 и аналитическое вычисление производных модельной функции по параметрам, обеспечивают высокую скорость работы программы *MuonFit*. Так, при обработке одной гистограммы длиной 1600 каналов простейшей модельной функцией

$$BG + Ne^{-\frac{t}{\tau}}(1 + a \exp(-\lambda t) \cos(\omega t + \varphi))$$

на одну итерацию требуется

- на процессоре 80386SX-25 + 80387 ~ 2 с;
- на процессоре Pentium-100 ~ 0.1 с.

Необходимое число итераций определяется такими факторами, как вид модельной функции и близость начальных величин подгоночных параметров к оптимальным. В среднем требуется 3–10 итераций.

Ограничения и апробация

Программа *MuonFit* работает на IBM PC совместимом компьютере (не ниже чем PC AT) под управлением операционной системы MS DOS версии 5.0 или более

поздней. Желательно наличие математического сопроцессора. Требуемый видеоадаптер — EGA или VGA. Для работы программы необходимо 500 кб базовой памяти и 1 Мб EMS-памяти.

Максимальная длина обрабатываемой гистограммы — 8192 канала. Максимальное число одновременно обрабатываемых гистограмм — 8. Суммарное (по всем фитируемым гистограммам) число параметров — до 100, среди них варьируемых независимых параметров — до 50, максимальное число подгоночных параметров модельной функции — 30.

Программа *MuonFit* использовалась для обработки экспериментальных данных, полученных на фазотроне ЛЯП ОИЯИ и мезонной фабрике PSI (Швейцария).

Программа *MuonFit*, сопутствующие утилиты и источники доступны через анонимous ftp по адресу: moonhe.jinr.dubna.su:/pub/pc/musoft.

В заключение авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность А.Н. Пономареву, чья программа обработки μ SR-спектров *MUON* была положена в основу программы *MuonFit*, И.Л. Чаплыгину — за предоставленную графическую библиотеку, И.А. Кривошееву и В.С. Курбатову — за ценные замечания и советы.

Список литературы

- [1] Schenck A. Muon Spin Rotation Spectroscopy, Adam Hilger Ltd, Bristol, 1985.
- [2] Marquart D.W. J. Soc. Appl. Math., 11(2) (1963), 431.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 мая 1996 года.