

9741

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



Ц 8406

3466/2-76

6/IX-76

P10 - 9741

A-211

С.Р.Аврамов, Е.В.Сосновская, В.М.Цупко-Ситников

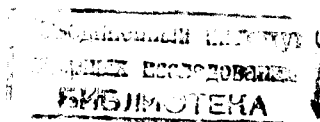
СИСТЕМА ПРОГРАММ SIMP ДЛЯ ОБРАБОТКИ
ГАММА-СПЕКТРОВ

1976

P10 - 9741

С.Р.Аврамов, Е.В.Сосновская, В.М.Цупко-Ситников

СИСТЕМА ПРОГРАММ SIMP ДЛЯ ОБРАБОТКИ
ГАММА-СПЕКТРОВ



1. Введение

Важным источником информации для решения большого числа научно-исследовательских и прикладных задач являются гамма-спектры радиоактивных источников. Это обусловило значительный интерес к обработке таких спектров, о чем свидетельствует ряд работ /см., например, /1-5/ и библиографию к ним/. При ознакомлении с этими работами создается впечатление, что в настоящее время достаточно хорошо разработана методика обработки гамма-спектров и можно составить универсальную программу на основе одного из предложенных общих методов.

Однако сравнение результатов обработки гамма-спектров, проводимое в Отделе ядерной спектроскопии и радиохимии ЛЯП ОИЯИ при использовании разных программ /1, 2, 6, 7/ за последние несколько лет, а также детальное изучение задачи показывают, что разработка универсальной программы наталкивается на принципиальные трудности. Каждая такая программа содержит набор определенных алгоритмов для решения частных задач. На практике часто оказывается, что конкретный алгоритм, успешно применяемый при обработке некоторой, иногда значительной части информации, ненадежен при обработке остальной ее части. Другими словами, использование одного конкретного алгоритма для решения частной задачи связано с отказом от обработки части информации. В зависимости от ценности этой информации ею либо пренебрегают, либо для ее интерпретации прибегают к грубым "ручным" оценкам, в то время как для таких случаев необходимо привлечение

более совершенных методов. Последние, однако, сложны и требуют больших затрат труда, поэтому их использование при обработке всей информации невыгодно. Чтобы программа обработки была универсальной, т.е. пригодной для обработки всей информации, она должна располагать наборами алгоритмов, причем выбор одного из них обуславливается характером данных. По-видимому, в связи с этим некоторые авторы программ /см., например, /8,9/ /предусматривают иногда по нескольку алгоритмов для той или другой части задачи. Однако для ряда прикладных задач, где можно ограничиться рассмотрением наиболее характерной части информации, вполне допустима обработка, основанная на использовании простых методов с "жестко" заданными алгоритмами.

В соответствии с этими представлениями о программном обеспечении для массовой обработки спектров в ОЯС и РХ ЛЯП ОИЯИ разрабатываются и используются на ЭВМ разных классов системы программ, удовлетворяющие разнообразным требованиям автоматизированной обработки. К ним относятся: комплекс дисплейных программ /10/ для предварительной обработки, система ЭПОС /11/ для экспресс-обработки и система программ SIMP для прецизионной обработки гамма-спектров.

В данной работе приводится общее описание системы программ SIMP и принципов ее организации. Существенной особенностью системы SIMP является заложенная в ее структуре возможность использования различных конкретных алгоритмов для решения всех частных задач, составляющих отдельные этапы метода анализа пиков.

2. Общая характеристика используемого метода

Система программ SIMP для прецизионной обработки гамма-спектров представляет собой набор взаимосвязанных программ. Структура системы обусловлена особенностями метода анализа пиков /МАП/.

Исходные положения этого метода следующие:

1/ Полезную информацию в гамма-спектре несут пики. Части гамма-спектра, в которых пики не прояв-

ляются, считаются неинформативными и при обработке не рассматриваются. Информативные же участки содержат группу пиков без неинформативных частей между ними. Фон под пиками информативных участков обусловлен комптоновским рассеянием гамма-квантов с большими энергиями.

2/ Для каждого информативного участка строится математическая модель спектра, зависящая от некоторых параметров. Она является суммой моделей пиков и фона. Параметры модели определяются в результате аппроксимации спектра на участке функцией, представляющей его модель.

3/ Параметры модели пика делятся на главные и вспомогательные. Главных параметров два: первый связан с энергией гамма-квантов, зарегистрированных в пике, второй - с его интенсивностью. Чаще всего в качестве первого главного параметра берут абсциссу максимума модельной функции пика, а в качестве второго - суммарное количество импульсов в пике /площадь пика/. Вспомогательные параметры описывают детали формы модельной функции и служат для ее подгонки к форме пика спектра. В дальнейшем они называются параметрами формы. Между главными параметрами и соответствующими физическими величинами предполагаются взаимно-однозначные соответствия. Эти соответствия определяются в результате специальных градуировочных измерений, называемых калибровками.

Таким образом, согласно представлениям метода анализа пиков задача обработки гамма-спектров сводится к определению главных параметров для всех пиков в спектре, построению калибровочных зависимостей и вычислению при помощи этих зависимостей характеристик гамма-спектра, т.е. энергий и относительных интенсивностей соответствующих гамма-переходов.

Из приведенных соображений следует, что при использовании метода анализа пиков для обработки гамма-спектров возникает ряд последовательных частных задач:

- выбор модели пика,
- выбор модели фона,

- выбор модели калибровочных зависимостей,
- разбиение спектра на участки,
- составление уравнений, соответствующих выбранной модели участка и выбранному алгоритму для определения параметров модели участка,
- определение начальных приближений для всех параметров, если выбранная модель приводит к решению системы нелинейных алгебраических уравнений,
- последовательное определение параметров модели для всех информативных участков в спектре,
- вычисление характеристик гамма-спектра с помощью калибровочных зависимостей.

Общая схема преобразования спектрометрической информации в данные о гамма-спектре при использовании метода анализа пиков приводится на *рис. 1*.

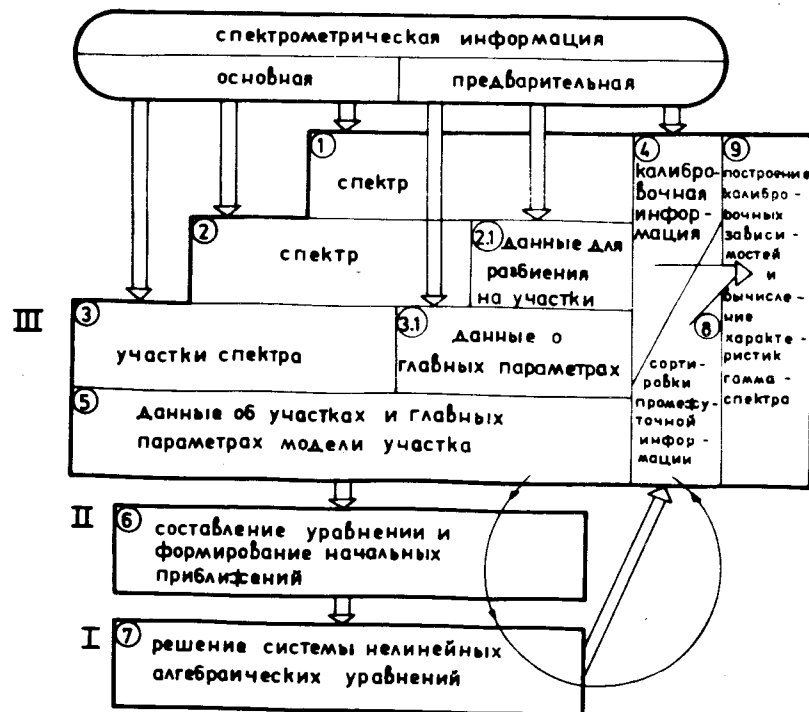


Рис. 1. Общая схема преобразования спектрометрической информации в данные о гамма-спектре при использовании метода анализа пиков.

Из *рис. 1* видно /процедуры 1,2,3/, что ввод исходной информации о спектре может производиться в разном объеме. В первом случае вводится только спектр, при этом предполагается автоматический поиск пиков в спектре, а затем разбиение на участки. Во втором случае вводится спектр и предварительная информация /процедура 2.1/ для разбиения спектра на участки. В третьем случае вводится спектр по участкам и данные о главных параметрах пиков /процедура 3.1/.

Во всех трех случаях вводится калибровочная информация /процедура 4/. Независимо от способа ввода введенная информация должна быть определенным образом преобразована и представлять собой результат разбиения спектра на участки /5/ для того, чтобы приступить к составлению уравнений и к определению начальных приближений /процедура 6/, а затем и к процедуре определения параметров /7/. Определенные при выполнении /7/ значения главных параметров накапливаются и сортируются /процедура 8/. Номером 9 обозначены процедуры калибровок и вычисления характеристик гамма-спектра, завершающие обработку.

На *рис. 1* двойными стрелками указывается общая последовательность выполнения отдельных процедур метода анализа пиков. Тонкими стрелками обозначен цикл процедур 5,6,7,8, заканчивающийся после обработки всех участков спектра.

Рис. 1 является общей схемой МАП, которая позволяет выделить все процедуры, требующие и допускающие различные реализации. Очевидно, что по-разному могут осуществляться такие процедуры, как ввод информации в память ЭВМ /количество вводимой информации и соотношение основной и предварительной информации может быть различно/; разбиение на участки и определение начальных приближений для главных параметров; выбор используемых моделей и алгоритма определения параметров /в зависимости от последних двух пунктов составляются уравнения и задаются начальные приближения/.

3. Структура системы программ

Из обсуждения особенностей метода анализа пиков следует, что конкретная программа /содержащая фиксированные алгоритмы для частных задач метода/ по своей структуре представляет собой общую организующую программу, которая последовательно обращается к фиксированным алгоритмам, реализующим частные задачи ввода, разбиения на участки, составления уравнений, соответствующих конкретной модели; определения параметров, сортировки результатов, восстановления калибровочных зависимостей, вычисления характеристик гамма-спектра.

Переход к другой конкретной программе сводится к замене набора фиксированных алгоритмов другим набором.

Назначение системы программ SIMP - обеспечить возможность таких переходов по требованию пользователя в зависимости от характера конкретной спектрометрической информации. Таким образом, в систему включены разные фиксированные алгоритмы для решения одинаковых задач. Совокупность таких алгоритмов называется блоком. Фиксированный алгоритм может реализоваться в нескольких подпрограммах. Среди них выделяется головная подпрограмма, которая организует вызов остальных. Ясно, что количество элементов блока соответствует количеству головных подпрограмм.

Система SIMP состоит из пяти блоков. Первый блок содержит подпрограммы определения параметров. Второй - подпрограммы составления уравнений соответственно конкретным моделям. К третьему блоку относятся организующие подпрограммы. Ввиду того, что подпрограммы ввода могут рассматриваться иногда как организующие, они включены в третий блок. К третьему блоку отнесены также подпрограммы восстановления калибровочных зависимостей и вычисления характеристик гамма-спектра, сортировок и выдачи результатов на АЦПУ. Это исключение из общего принципа формирования блоков объясняется тем, что все эти процедуры оперируют со всей исходной, промежуточной или конечной информацией о спектре.

Первые три блока системы являются основными. Для реализации конкретной программы МАП использована возможность алгоритмического языка ФОРТРАН^{12/} указывать в качестве формального параметра подпрограммы имя вызываемой подпрограммы. Конкретная программа МАП компонуется обращением к некоторой головной подпрограмме третьего блока с фактическими параметрами - именами конкретных требуемых подпрограмм, вызываемых ею. Все основные программы, вызывающие головные подпрограммы третьего блока, объединены в четвертый блок системы, блок "шапок". Роль основной программы может сводиться к простому вызову

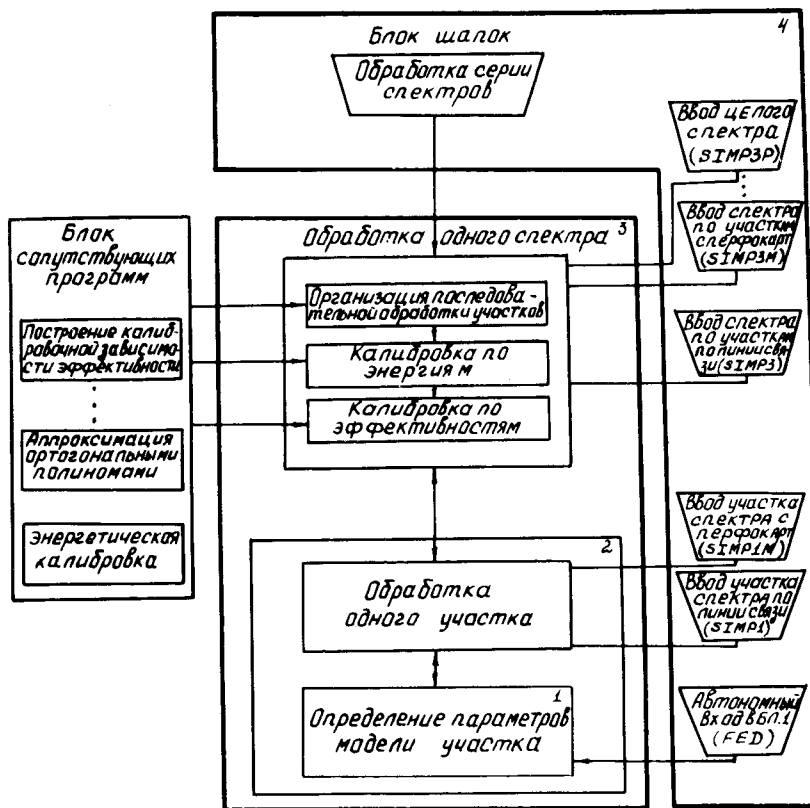


Рис. 2. Блок-схема системы программ SIMP.

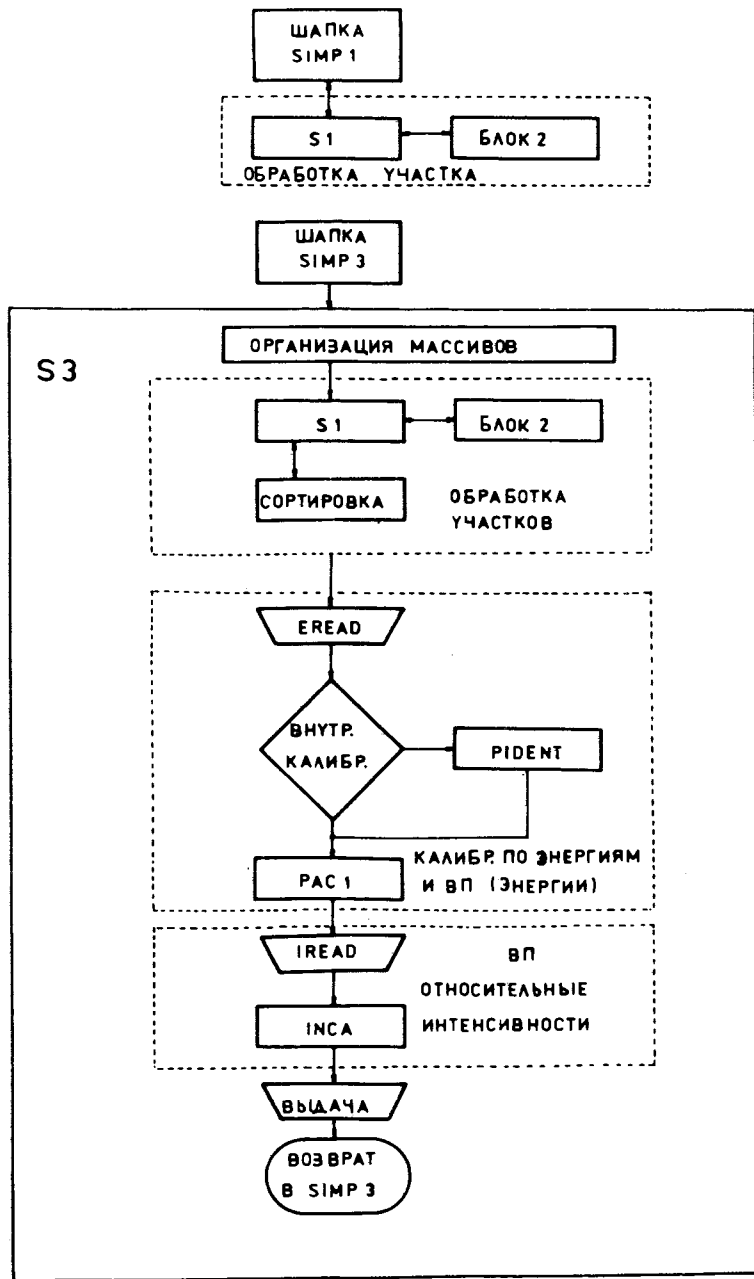


Рис. 3. Организация вызова разных комбинаций конкретных подпрограмм системы SIMP.

третьего блока либо к этой же операции с последующим анализом данных о характеристиках γ -спектра. Поскольку при обработке гамма-спектров возникает ряд задач по подготовке предварительной информации /например, восстановление некоторой калибровочной зависимости/, в систему включен набор соответствующих программ, предназначенных для решения этих задач. Они составляют блок сопутствующих программ.

Блок-схема системы программ SIMP представлена на рис. 2. Примеры вызова конкретной программы метода анализа пиков показаны на рис. 3. Подпрограммы, участвующие в этих конкретных программах, описаны в следующем параграфе. Организация вызова конкретных программ осуществляется по принципу считывания с МЛ личной библиотеки системы SIMP.

4. Возможности системы программ в настоящее время

В блоке 1 для определения параметров нелинейной модели экспериментальных данных используются два алгоритма: Левенберга-Маркардта и "минимальных поправок". Подробное описание этих алгоритмов дано в работах /13,14/. Алгоритм Левенберга-Маркардта предназначен для быстрой обработки значительной части информации. Алгоритм "минимальных поправок" - для обработки особо сложных участков спектра, применение к которым первого алгоритма не дает удовлетворительных результатов.

Представление о затратах времени на пик дает следующая таблица /для ЭВМ БЭСМ-6/.

Таблица 1

№№ п/п	Количество пиков в спектре	Время обработки пика /в секундах/
1	30	0,2
2	60	0,83
3	150	1,2
4	200	1,5

Второй блок содержит четыре варианта параметризации. Моделью пика во всех вариантах является гауссиан:

$$G(x) = a e^{-1/2 \left(\frac{x-p}{\sigma} \right)^2}, \quad /1/$$

где a - амплитуда пика, x - номер канала, p - позиция пика, σ связана с полушириной пика ρ соотношением $\rho = \sigma \sqrt{8 \ln 2}$.

Амплитуда представляется выражением

$$a = \frac{C}{\sqrt{2\pi} \sigma},$$

где C - площадь пика. Моделью фона во всех вариантах является полином от X .

Варианты параметризации отличаются между собой определяемыми параметрами модели пика, как показано в табл. 2.

Таблица 2

№ варианта модели участка	Определяемые параметры			
	C	ρ	σ	a
1	+	+	+	
2	+	+	фиксир.	
3		+	+	+
4		+	фиксир.	+

В таблице знаком "+" отмечены те величины, которые являются определяемыми параметрами для данного варианта параметризации. Необходимо отметить, что главные параметры C, ρ /либо a, ρ / определяются для каждого пика на участке, параметр σ - для всего участка в первом и третьем вариантах, а во втором и четвертом он фиксирован.

На рис. 4 показаны возможные реализации второго блока с учетом четырех вариантов модели участка и двух алгоритмов для определения параметров.

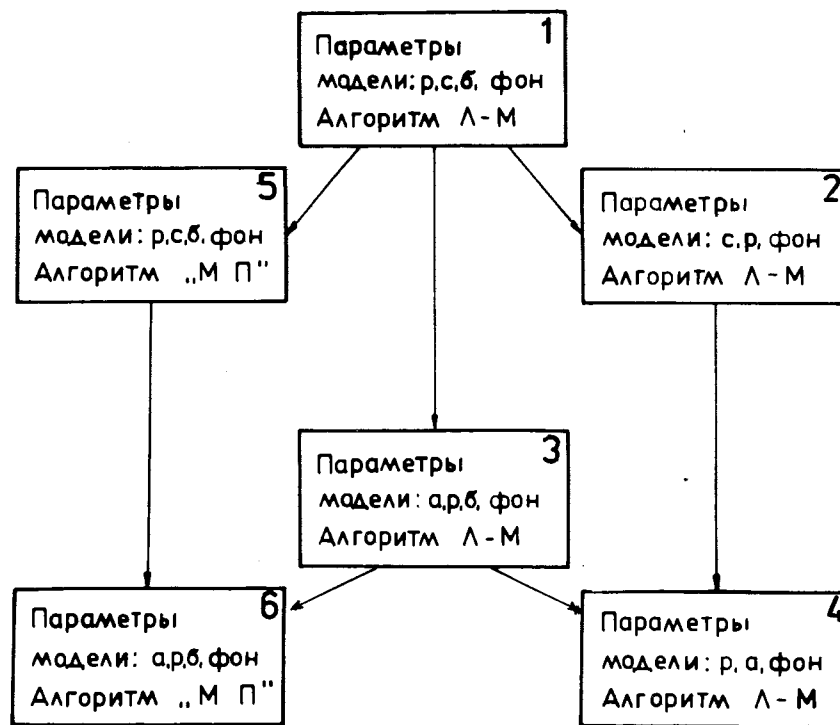


Рис. 4. Возможные реализации второго блока с учетом четырех вариантов параметризации и двух алгоритмов для определения параметров.

Под номерами 5 и 6 приведены комбинации соответственно первого и третьего вариантов параметризации с использованием алгоритма "минимальных поправок".

К третьему блоку относятся организующие подпрограммы /головные/ и подпрограммы некоторых конкретных алгоритмов.

Организующие подпрограммы делятся на две группы: подпрограммы обработки спектра по участкам; подпрограммы, осуществляющие обработку всего спектра.

В подпрограммах первой группы промежуточная информация не накапливается, а непосредственно выводится на АЦПУ. Кроме ввода, эти подпрограммы осуществляют стандартизацию информации и вызов головных подпрограмм второго блока. Выделение этой процедуры в отдельную подпрограмму позволяет вводить информацию от разных носителей.

Например, для обеспечения обработки информации, передаваемой по линии связи "Минск-2" - БЭСМ-6^{/15/}, составлена подпрограмма с именем S1. Она вводит информацию, разбиение которой на участки и задание начальных приближений для ее обработки проводится стандартным образом при помощи ОСК в измерительно-вычислительном центре Отдела ядерной спектроскопии и радиохимии ЛЯП ОИЯИ на базе ЭВМ "Минск-2". Пример составления конкретной комбинации с использованием S1 показан на блок-схеме *рис. 3а*. Основная программа-шапка SIMP 1 циклически вызывает организующую подпрограмму третьего блока S1, которая, в свою очередь, вызывает головную подпрограмму второго блока с именем SIMPAN, соответствующую первому варианту параметризации, параметры которой определяются методом Левенберга-Маркардта. В этом случае третий блок представлен только организующей подпрограммой S1.

Организующей подпрограммой второй группы является S3. Способ ввода информации при ее использовании не фиксирован. Его могут осуществлять как организующие подпрограммы первой группы, так и подпрограммы, вводящие спектр целиком.

Пример конкретной программы с участием S3 показан на *рис. 3б*. Такая комбинация предназначается для

обработки спектров, передаваемых по линии связи ЭВМ "Минск-2" - БЭСМ-6 в стандартном виде, описанном выше при рассмотрении примера на *рис. 3а*. При вызове S3 программой-шапкой SIMP 3 в качестве фактических параметров S3 перечисляются следующие имена подпрограмм: S1, SIMPAN, EREAD, PACI, IREAD и INCA. В S3 прежде всего производится распределение памяти и организация массивов, затем - циклическая обработка участков спектра /аналогично случаю, показанному на *рис. 3а/*, результаты которой сортируются и накапливаются. По окончании обработки всех участков спектра подпрограммой EREAD в ЭВМ вводится информация о калибровке по энергиям. В процедуре калибровки по энергиям предусмотрены две возможности: калибровка по внешним и внутренним данным. В первом случае все калибровочные данные вводятся извне, во второй позиции калибровочных пиков выбираются с помощью подпрограммы PIDENT из результатов обработки текущего спектра. В обоих случаях калибровочная зависимость строится в подпрограмме PACI. Затем подпрограмма IREAD вводит данные о калибровке по эффективностям, которая производится в подпрограмме INCA. Результаты обработки выдаются на АЦПУ в виде сводной таблицы, и управление передается шапке SIMP 3 для обработки следующего спектра. Разные варианты подобных конкретных комбинаций в соответствии с желаемым способом ввода, разметки и обработки участков, ввода информации для калибровок можно получить, используя описанные выше элементы системы.

К блоку шапок относятся основные программы типа SIMP 1, SIMP 3, а также сложные программы, интерпретирующие результаты обработки серии спектров. Примером сложных программ являются программа SIMPEC, которая обрабатывает серию спектров /до 14/ с последующим определением периодов полураспада изотопов радиоактивного источника, и программа SIMPAC для определения активностей изотопов.

К блоку сопутствующих программ мы относим подпрограммы системы, которые непосредственно не включаются в конкретные комбинации обработки спектров.

В этом блоке в данный момент имеются программы для энергетической калибровки уже обработанных спектров; программы для построения зависимости эффективности детектора от энергии регистрируемого гамма-излучения по данным, полученным из одного или разных источников, а также программы для аппроксимации данных ортогональными полиномами.

5. Перспективы дальнейшего развития системы

Приведенные сведения о наборе процедур и структуре системы SIMP дают представление о возможностях ее использования для обработки гамма-спектров, а также о перспективах ее развития в дальнейшем. Перспективы развития системы программ прежде всего связаны с возможностью использования новых алгоритмов на разных этапах метода анализа пиков. Добавление какого-либо нового варианта в один из основных блоков системы приводит к появлению нового набора конкретных комбинаций подпрограмм.

Возможными направлениями развития системы программ являются:

- организация новых способов ввода в соответствии с новым типом накопителей информации;
- составление новых обрабатывающих подпрограмм третьего блока;
- добавление новых вариантов второго блока с более сложными моделями участков и новыми методами для определения параметров.

Заключение

Система программ SIMP использовалась для обработки информации, получаемой в Отделе ядерной спектроскопии и радиохимии при исследованиях по программе ЯСНАПП^{/16/}, что позволило значительно улучшить сведения о распаде ряда изотопов, см.^{/17/} и др./ С по-

мощью программ этой системы получены важные сведения об образовании высокоспиновых возбужденных состояний при захвате отрицательных пионов ядрами тяжелых элементов^{/18,19/} и др. Программы используются и при решении прикладных задач^{/20/}.

К настоящему времени число спектров, обработанных программами системы SIMP, около 1500. Это составляет порядка 100 000 нелинейных задач интерпретации экспериментальных данных. Неблагополучный исход обработки наблюдался только в случае ошибочной предварительной информации.

Литература

1. В.Гаджожков. ОИЯИ, 10-5255, Дубна, 1970.
2. J.I.Routti, S.G.Prussin. Nucl.Instr. and Meth., 72, 125 /1969/.
3. I.A.Slavic, S.P.Bingulac. Nucl.Instr. and Meth., 84, 261 /1970/.
4. F.P.C.Huang et al. Nucl. Instr. and Meth., 68, 141 /1969/.
5. T.Inouye et al. Nucl.Instr. and Meth., 67, 125 /1969/.
6. G.Winter. D-tsch Akad. Wissen. Berlin ZK Rossendorf, Dresden, 259, 1969.
7. С.Р.Аврамов. ОИЯИ, Дб-7034, Дубна, 1973.
8. Э.Рупп. ОИЯИ, 10-6614, Дубна, 1972.
9. П.Гуппнер, К.-Г.Каун, Ф.Стари, Н.Ф.Трускова. ОИЯИ, 11-8195, Дубна, 1974.
10. Л.Вылова и др. ОИЯИ, Р10-7061, Дубна, 1973.
11. Г.Элер и др. ОИЯИ, Р10-6817, Дубна, 1972.
12. Язык ФОРТРАН, под ред. В.П.Ширикова. ОИЯИ, 11-4818, Дубна, 1970.
13. С.Р.Аврамов. ОИЯИ, Дб-8846, Дубна, 1975.
14. П.Н.Заикин, С.Г.Кандауров. В сб. "Некоторые вопросы автоматической обработки и интерпретация физических экспериментов", под ред. А.И.Тихонова и др. Вып.3, ВЦ МГУ, М., 1975.
15. С.Р.Аврамов, Л.Александров и др. ОИЯИ, 10-6467, Дубна, 1972.
16. Р.Арльт и др. ЭЧАЯ, т. 5, вып. 4, стр. 843 /1974/.

17. С.Р.Аврамов , Ц.Вылов и др. Программа и тезисы докладов XXV Сессии по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Ленинград, 1975, стр. 91, а также 92, 93, 96, 99.
18. В.С.Бутцев, Ю.А.Гаверилов и др. ЖЭТФ, т. 21, вып. 6, стр. 400-403, 1975.
19. S.R.Avramov, V.S.Butsev et al. The IV Int. Conf. on High Energy Physics and Nucl. Struct., Santa Fe, New Mexico, 1975 /190/.
20. Л.И.Москвин и др. АЭ, т. 39, вып. 5 /1975/.

*Рукопись поступила в издательский отдел
26 апреля 1976 года.*