

P13-2002-94

Н. В. Астахова, К. Вальтер¹, Н. Д. Дикусар,
И. М. Саламатин, А. Фришбутгер², К. Шеффцюк

**КОМПЛЕКС ПРОГРАММ
ДЛЯ ОПТИМАЛЬНОЙ НАСТРОЙКИ ДЕТЕКТОРОВ
ДИФРАКТОМЕТРА EPSILON**

¹FZK, Россендорф

²GRC, Потсдам

1. Введение

Эффективность работы установки в физическом эксперименте часто определяется настройкой некоторого набора параметров. Их оптимальные значения, как правило, заранее не известны, и их требуется получить в процессе калибровочных измерений. Такими параметрами могут быть, например, положения мишеней [1], углы установки поляризаторов [2], рабочее напряжение счетчиков Гейгера-Мюллера [3] и др.

Обычно работа по определению оптимальных оценок параметров сопряжена со значительным расходом времени экспериментатора на выполнение большого числа однотипных операций, что стимулирует ее автоматизацию. Каждый спектрометр имеет собственный набор параметров и различные алгоритмы их оптимизации, что предполагает заново создавать соответствующие наборы программ. Обычно такой набор включает программы, отражающие специфику спектрометра, и программы, не зависящие от такой специфики, что позволяет унифицировать отдельные части программного обеспечения.

В сообщении описана разработка варианта программного обеспечения, часть которого пригодна для решения таких задач на различных установках.

2. Оборудование и параметры оптимизации

В дифрактометре EPSILON [3] в качестве детекторов нейтронов используются нейтронные гелиевые счетчики типа 6NH12.5/1F/ACHP96F. Счетчики сгруппированы по 11 штук и размещены в 9 угловых позициях. К каждому детектору подключен индивидуальный программно-управляемый источник высокого напряжения. Коэффициенты усиления и пороги дискриминации выбраны в предварительных измерениях, зафиксированы и не контролируются. В качестве параметра, по которому оптимизируется режим работы детекторов, выбирается рабочее напряжение счетчиков, а в качестве контролируемого параметра – эффективность регистрации нейтронов (здесь не описывается).

Источники напряжения SY403(C.A.E.N.) размещены в 2 крейтах по 64 в каждом. Управление крейтом может осуществляться с панели ручного управления, по последовательному каналу RS232 терминалом типа VT100, а также с помощью контроллеров A303 H.S. CAENET PC Controller, C117B H.S. CAENET CAMAC Controller, V288 H.S. CAENET VME Controller.

В данной работе использован канал RS232 и симулятор терминала VT100.

3. Структура программного обеспечения

На рис. 1 показана структура программного обеспечения описываемой системы. Система включает управляющую программу и ряд подчиненных ей функциональных программ, которые могут работать вне связи с данным комплексом и выполнять запрограммированные функции под управлением оператора (пользователя)

либо по командам от управляющей программы данного комплекса. Функциональные программы оформлены как отдельные задачи и имеют два режима работы: диалоговый и автоматический.

В диалоговом режиме параметры задачи задаются путем редактирования определенных полей в окне задачи, выполнение запрограммированной функции начинается по команде пользователя.

В автоматическом режиме работы функциональная программа получает команды и значения параметров от управляющей программы. Оба режима доступны одновременно без дополнительной настройки. Каждая из функциональных программ после выполнения работы посылает сообщение управляющей программе.

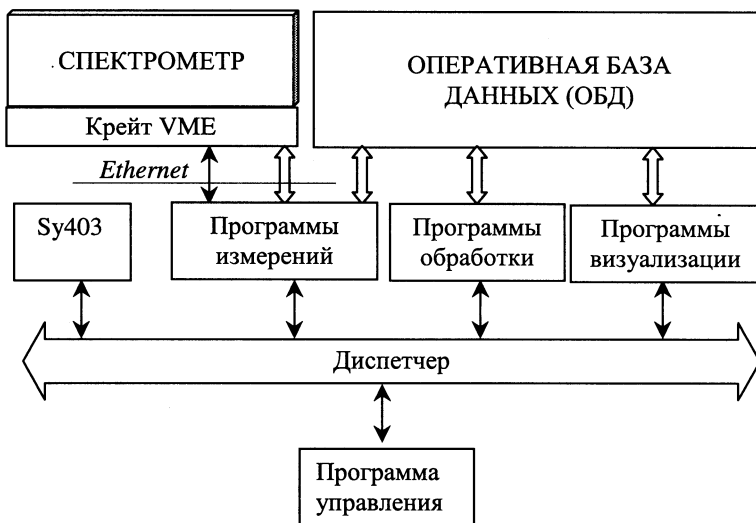


Рис.1.

В систему включены следующие функциональные программы:

- установки рабочего напряжения детекторов (Sy403);
- управления измерением (ASA);
- обработки экспериментальных данных (Locus);
- визуализации и оформления результатов работы (Graph);

Кроме этого, в системе используются компоненты общего назначения, такие, как:

- диспетчер сообщений, обслуживающий передачу параметров и сообщений между задачами (Disp);
- база данных реального времени (ОБД), обеспечивающая возможность хранения в оперативной памяти массивов данных и быстрого доступа к ним всем задачам комплекса.

Структура используемых массивов данных описана в специальном модуле, который используется при трансляции программ, работающих с этими массивами. Помимо этого, в модуле данных декларированы управляющие параметры, такие как:

- карта коллиматоров (9 шт.) и детекторов (11 шт. на каждый коллиматор), для которых требуется выполнить измерения и скорректировать рабочие напряжения;
- диапазон напряжений, шаг сканирования (количество точек).

В модуле данных помещена также библиотека функций (Lib_Sy403), специфических для данной задачи и данного спектрометра:

- функции, документирующие результаты работы системы в виде таблицы соответствия коллиматор – детектор – напряжение (такой файл нужен системе, выполняющей штатные эксперименты);
- текстовые файлы результатов измерений для каждого детектора, представленных в виде, удобном для различных вариантов обработки и визуализации графическими пакетами общего назначения;
- ряд служебных функций для отладки и тестирования системы.

Для краткости приведем характеристики лишь отдельных компонентов, упомянутых в структуре (рис.1).

3.1 Программа установки рабочего напряжения детекторов

Программа Sy403 выполняет две команды:

- инициализирует крейт SY403;
- устанавливает заданное рабочее напряжение.

Одинаковое рабочее напряжение устанавливается на всех детекторах. После установки напряжения посылается сообщение управляющей программе о готовности условий измерения. В данную программу встроен также симулятор терминала VT100. Вызвав симулятор, можно управлять крейтами SY403 в диалоговом режиме.

3.2 Программа управления измерением

Программа обеспечивает взаимодействие с крейтом VME, в котором работает программное обеспечение комплекса SONIX [4]. Собственно измерение выполняется средствами SONIX, данная программа по сети передает параметры, необходимые для выполнения однократного измерения спектров от всех детекторов, принимает сигнал о завершении экспозиции, переписывает данные в ОБД и сообщает управляющей программе о готовности данных.

3.3 Управляющая программа

Основные действия управляющей программы:

- запуск подчиненных программ и их инициализация;
- начало (по команде пользователя) выполнения измерений в заданном диапазоне напряжений с заданным шагом (либо продолжение измерений с точки, на которой по какой-то причине они были прерваны).

При этом определенное число раз повторяется одна и та же группа операций:

- выборка следующего значения рабочего напряжения;

- установка такого напряжения на всех источниках в крейте SY403;
- выполнение измерения;
- передача данных на обработку.

В процессе измерений можно просматривать измеренные спектры для заданного коллиматора в виде двумерных графиков, где по одной оси откладывается время пролета нейтронов, по другой – номера 11 детекторов. После прохода по всему заданному диапазону напряжений по счетным характеристикам детекторов вычисляются рекомендованные значения рабочих напряжений, и результаты записываются в файлы.

После этого в любой момент времени измеренные данные (рис.2) и результаты вычислений могут быть снова загружены в ОВД для анализа и коррекции в диалоговом режиме. Пользователь может отбраковать любые измеренные точки, выполнить вычисления со скорректированным набором точек либо указать результирующее значение напряжения курсором на графике счетной характеристики.

4. Вычисление оптимальных оценок параметров

Для вычисления оптимальных оценок рабочих напряжений счетчиков в спектрометре используется алгоритм локального кубического сглаживания LOCUS [5], так как поведение отсчетов показаний счетчиков в зависимости от приложенных напряжений (рис.2) можно аппроксимировать кубической кривой или набором кубических сегментов. Цель такой аппроксимации состоит в вычислении рабочей точки детектора, которая находится в точке перегиба кривой. Оптимальное значение напряжения можно вычислить через

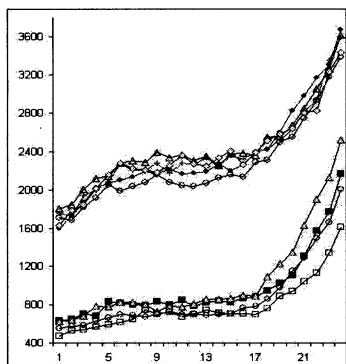


Рис.2

вторую производную кривой регрессии, построенной по выборкам точек для каждого детектора. Параметры кривой регрессии могут быть вычислены по стандартной схеме метода наименьших квадратов (МНК). В случаях, когда кривая измерений отклоняется от кубической формы, она может быть представлена набором кубических сегментов (локальных сплайнов). Алгоритм сглаживания LOCUS вычисляет оценки параметров кривой регрессии в режиме «точка за точкой». Это позволяет автоматически находить границы кубических сегментов на кривой более сложной формы. Детальное изложение метода адаптивного сглаживания кривых и поверхностей приведено в работах [5, 6]. Здесь мы дадим лишь краткое описание алгоритма.

4.1. Алгоритм локального кубического сглаживания

Для вычисления оценки кривой регрессии \hat{f} по заданной выборке $\{x_k, \tilde{f}_k\}_{k=1}^N$, где

$\tilde{f}_k = f(x_k) + e_k, e_k \sim N(0, \sigma^2)$ – ошибки, мы будем использовать модель 3-точечного кубического сплайна (TPS) [5] вместо стандартной модели кубической параболы с четырьмя коэффициентами $s(\tau) = a_0 + a_1\tau + a_2\tau^2 + a_3\tau^3$.

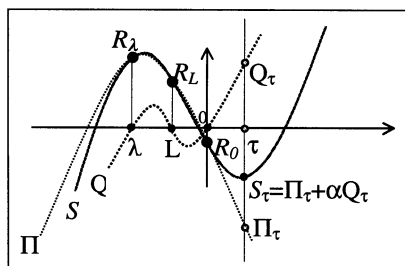
В конструкции TPS-модели (рис. 3) три точки кривой (R_λ, R_L и R_0) являются фиксированными параметрами, а четвертый параметр α остается свободным, и уравнение модели записывается в виде:

$$S(\tau; \lambda, L) = R_\lambda d_1(\tau; \lambda, L) + R_L d_2(\tau; \lambda, L) + R_0 d_3(\tau; \lambda, L) + \alpha Q(\tau; \lambda, L) = \Pi_\tau + \alpha Q_\tau. \quad (1)$$

Функции Q и $d_i, i=1,2,3$ определяются через абсциссы реперных точек:

$$Q = \tau(\tau - \lambda)(\tau - L), \quad d_1 = -\tau(\tau - L)/\lambda H, \quad d_2 = \tau(\tau - \lambda)/LH \quad \text{и} \quad d_3 = (\tau - \lambda)(\tau - L)/\lambda L,$$

т.е. они зависят от двух параметров λ, L ($H = L - \lambda, \lambda \neq L$) и τ . Координаты точек $R_1 \equiv R_\lambda, R_2 \equiv R_L, R_3 \equiv R_0$ – образуют репер \mathfrak{R} . Как следует из (1), ордината



точки кривой S_τ определяется через сумму ординат двух точек: одна точка расположена на квадратичной параболе Π_τ , проходящей через три реперные точки, а другая αQ_τ расположена на «зануляющей» кубической параболе Q_τ , корни которой равны λ, L и 0 . Такое представление кубической дуги имеет некоторое преимущество по сравнению с ее стандартным видом.

Рис. 3. TPS-модель.

При закреплении трех точек на кривой вид кубической дуги можно менять, варьируя только один свободный параметр α . Это дает возможность получить рекуррентную формулу [6] для вычисления оценки параметра α , используя рекурсивный метод наименьших квадратов (РНК) [7]:

$$\hat{\alpha}_n = \hat{\alpha}_{n-1} + \gamma_n [\tilde{f}_n - \hat{\Pi}_n - \hat{\alpha}_{n-1} Q_n], \quad \hat{\alpha}_0 = 0, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2)$$

где $\gamma_n = \frac{Q_n}{\sum_{k=1}^n Q_k^2}$ – коэффициент усиления, а \tilde{f}_n – отсчет кривой в точке τ_n .

Пусть $\{x_k, \tilde{f}_k\}_{k=1}^N$ – последовательность из $N \gg 4$ точек, измеренных на кривой $f(x)$ и упорядоченных по координате x . Конкретный вид кривой $f(x)$ нам обычно не известен. Значения $\tilde{R}_\lambda, \tilde{R}_L, \tilde{R}_0$ берутся из измерений, поэтому нам необходимо уменьшить влияние ошибок e_λ, e_L и e_0 при вычислении оценки $\hat{\alpha}$ в (2), а затем скорректировать реперные ординаты. Таким образом, вычисление оценок всех четырех параметров локального сегмента кривой по измеренным точкам будет выполняться в два этапа. Первый этап включает следующие шаги:

шаг 1. выбирается репер $\mathfrak{R} : \{(x_\lambda, \tilde{f}_\lambda), (x_L, \tilde{f}_L), (x_0, \tilde{f}_0)\} \in \{x_k, \tilde{f}_k\}_{k=1}^N$;

шаг 2. определяются параметры $\lambda = x_\lambda - x_0, L = x_L - x_0$ и $\tau_k = x_k - x_0$;

шаг 3. по формуле (2) вычисляются $\hat{\alpha}$, число точек n_α и граничные точки $x_b,$

x_e сегмента, внутри которого $|\tilde{f}_n - \hat{\Pi}_n(\mathfrak{R}) - \hat{\alpha}_n Q_n| < T_\alpha$, где T_α – порог.

На втором этапе используются $\hat{\alpha}$, n_α и стандартный МНК для вычисления оценок \hat{R}_b^* , \hat{R}_e^* и \hat{R}_0^* в точках $x_\lambda^* = x_b - x_0^*$, $x_L^* = x_e - x_0^*$, где $x_0^* = (x_b + x_e)/2$.

Как видно из формул (1) и (2), ошибка e_n и “реперные ошибки” e_λ , e_L и e_0 преобразуются через коэффициент γ_n и базисные функции d_{in} , $i=1, 2, 3$, т.е.

$$e_n \rightarrow \gamma_n e_n, e_\lambda \rightarrow \gamma_n d_{1n} e_\lambda, e_L \rightarrow \gamma_n d_{2n} e_L, e_0 \rightarrow \gamma_n d_{3n} e_0.$$

Графики соответствующих множителей приведены на рис. 3а в логарифмическом масштабе по обеим осям, из которых видно, что подавление “реперных ошибок” более чем на порядок хуже, чем подавление ошибки в текущей точке, что отрицательно влияет как на точность, так и на эффективность вычислений.

Для более эффективного подавления ошибок используется схема вычисления по параметрам. В этой схеме на кривой фиксируются две точки \bar{R}_λ и \bar{R}_L , а $\bar{R}_{0n} \equiv \tilde{f}_{n-1}$ и \tilde{f}_n становятся подвижными. При сдвиге нуля базисные функции преобразуются через изменения параметров λ_n и L_n . В этом случае, при $\tau_n \equiv h$ квадратичные функции d_{in} , переходят в дробно-линейные w_{in} , $i=1, 2, 3$ с асимптотами ± 1 , а кубическая функция $\alpha Q(\tau; \lambda, L)$ - в квадратичную.

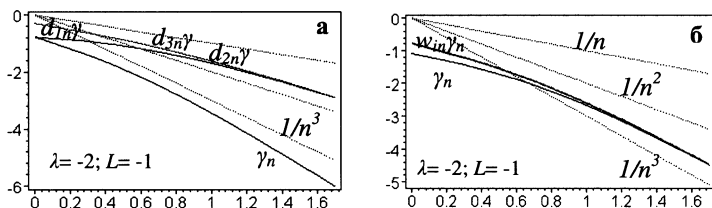


Рис. 4. Графики кривых подавления ошибок при различных схемах вычисления оценки $\hat{\alpha}$: а – прямое вычисление; б – вычисление по параметрам

Такая схема вычислений позволяет получить коэффициенты подавления ошибок в опорных точках того же порядка, что и γ_n (рис. 4б). На графиках видно, что, начиная с 5-ой точки, кривые подавления всех ошибок становятся практически одинаковыми и располагаются ближе к n^{-3} , т.е. начиная с 10-ой точки ошибки подавляются в сотни раз, и это позволяет вычислить оценку $\hat{\alpha}$ при грубых значениях реперных ординат.

4.2. Программа сглаживания

Алгоритм локального кубического сглаживания реализован в виде небольшого программного модуля LOCUS в среде Delphi5, включающего основные вычислительные процедуры. Значения показаний счетчиков заданы небольшими выборками, и поэтому для повышения точности оценка $\hat{\alpha}$ определяется в виде среднего оценок $\hat{\alpha}_F$ и $\hat{\alpha}_B$. Первая из них вычисляется для нормального порядка точек выборки, а вторая – для обратного. Для повышения устойчивости к ошибкам на на-

чальной фазе сглаживания производится взвешенное усреднение по трем или пяти точкам, ближайшим к опорным (процедура *GetStart*) в виде

$$\bar{R}_j = \sum_{i=j-m}^{j+m} \omega_i \tilde{f}_i / \sum_{i=j-m}^{j+m} \omega_i, \quad m = 1 \text{ или } 2,$$

где j – номер, связанный с реперными точками λ , L и 0 , а ω_i – известные веса.

После этого дважды вызывается процедура *GetAlpha* с указанием начальной точки и направления (*Forward* или *Backward*), что позволяет вычислить оценку свободного параметра в виде $\hat{\alpha} = (\hat{\alpha}_F + \hat{\alpha}_B) / 2$, и найти число точек n_α на сегменте.

На последнем этапе находим МНК-оценки остальных параметров сегмента кривой (процедура *Reper*) из условия

$$\sum_{i=1}^{n_\alpha} [f_i - \hat{\alpha} Q_i(\lambda^*, L^*) - \tilde{\Pi}_i(R_\lambda^*, R_L^*, R_0^*; \lambda^*, L^*)]^2 \rightarrow \min_{R_\lambda^*, R_L^*, R_0^*},$$

где параметры λ^* , L^* выбираются симметрично относительно средней точки на границах сегмента ($\lambda^* = -L^*$), а выражение для $\tilde{\Pi}_i(\cdot)$ определено в TPS-модели (1).

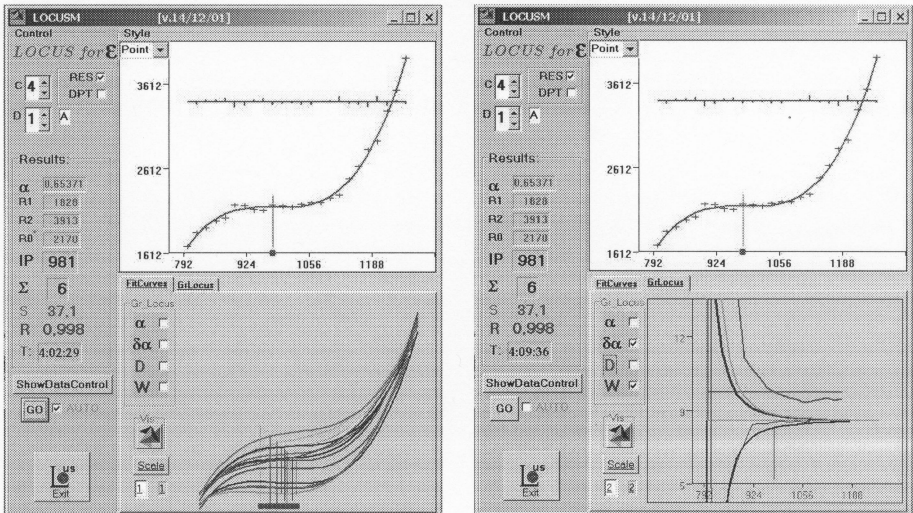


Рис. 5. Пример выдачи результатов обработки модулем LOCUS

Полученные значения оценок $\hat{\alpha}$, \hat{R}_λ^* , \hat{R}_L^* и \hat{R}_0^* , абсцисса точки перегиба (IP), оценка дисперсии (s), коэффициент корреляции (r) и сумма остатков (Σ) выводятся на панель результатов (рис. 5). Основные результаты расчета передаются в базу данных, а промежуточные вычисления сохраняются и используются для визуализации в виде графиков (рис. 5). На правом рисунке показаны графики, относящиеся к динамике процесса вычислений, например, вариация оценки $\hat{\alpha}$ в итерационном процессе, кривая поправок, графики остатков, вид весовых функций и т.п.

Результаты LOCUS-сглаживания показали хорошее согласие с аналогичными результатами по стандартной процедуре МНК для фиксированных выборок данных.

Последовательное вычисление оценки $\hat{\alpha}$ позволяет определять границы локальных «кубических» сегментов кривой, что дает возможность вести обработку данных в режиме их поступления и сглаживать кривые более сложной формы, чем кубическая. В этом случае оценка кривой регрессии ищется в виде суммы M ($M \geq 1$) локальных кубических сплайнов $S_j(x; \hat{\alpha})$ при условии, чтобы погрешность не превышала заданный порог:

$$\hat{f}(x) = \sum_{j=1}^M I_j(x) \hat{S}_j(x; \hat{\alpha}), \quad I_j(x) = \begin{cases} 1, & x \in A_j, \\ 0, & x \notin A_j, \end{cases} \quad (3)$$

где $\hat{\alpha}$ - набор параметров j -го сплайна, включающий его левый и правый узлы, а $\{A_j\}_{j=1}^M$ - набор отрезков $[x_b, x_e]_j \subseteq [a, b]$, причем $\bigcup_{j=1}^M A_j = [a, b]$.

5. Заключение

Предложенная структура программного обеспечения позволяет легко перестраивать программный комплекс для выполнения задач по оптимальной настройке спектрометров. Используемый метод сглаживания и поиск экстремума легко адаптируются к изменению формы кривой.

Литература

- [1] В.А. Вагов и др. Измерительный модуль спектрометра малоуглового рассеяния нейтронов на импульсном реакторе ИБР. Дубна, Р10-80-826, 1980.
- [2] В.В. Журавлев и др. Измерительно-накопительный модуль спектрометра на поляризованных нейтронах СПН-1. Дубна, Р3-95-140, 1995.
- [3] K. Walter, A. Frischbutter and Ch. Scheffzük. Modernization of the time-of-light diffractometer EPSILON for strain measurements of geological samples. Second German-Russian User-Meeting "Condensed Matter Physics with Neutrons", Dubna (Russia), April 21-25, 2001 (in press).
- [4] A. Kirilov. Current State and Perspectives of the IBR-2 Instrument Control Software. Proceedings of the Second International Workshop on Data Acquisition Systems for Neutron Experimental Facilities. Dubna (Russia) 5-7 June 2000.
- [5] N.D. Dikoussar. Comput. Phys. Commun., 99(1997), 235-254.
- [6] Н.Д. Дикусар. Кусочно-кубическое приближение и сглаживание кривых в режиме адаптации. Дубна, Р-10-99-168, 1999.
- [7] К.Ф.Н. Коуэн, П.М. Грант (ред.). Адаптивные фильтры, Мир, М., 1988.

Получено 25 апреля 2002 г.

Астахова Н. В. и др.

P13-2002-94

Комплекс программ для оптимальной настройки детекторов дифрактометра EPSILON

В работе рассматривается комплекс программ и программных модулей, используемых для выбора оптимальных рабочих напряжений детекторов в дифрактометре EPSILON. Для обработки показаний детекторов используется алгоритм локального кубического сглаживателя. Обсуждается также структура организации управления комплексом и способ взаимодействия программных пакетов в системе.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2002

Перевод авторов

Astahova N. V. et al.

P13-2002-94

A Complex of Programs for the Optimum Set-Up of Detectors of the Diffractometer EPSILON

A complex of programs and program modules used for finding the optimum operation voltage of detectors in the diffractometer EPSILON is considered. The algorithm of local cubic smoothing is used for data processing of detectors. The structure of organization of controlling the complex and the mode of interaction of the software packages in the system is considered as well.

The investigation has been performed at the Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2002

Редактор *М. И. Зарубина*
Макет *Е. В. Сабанеевой*

ЛР № 020579 от 23.06.97.

Подписано в печать 31.05.2002.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,5. Уч.-изд. л. 0,65. Тираж 320 экз. Заказ № 53334.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.