

# Anleitung zum Auswerteprogramm **PEAK3**

---

Auswertung von Vielkanal-Spektren und Matrizen

04.Okt.1990 K. Huber, Strahlencentrum Univ. Gießen  
Version 04.Mai.2020

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Anleitungs-Formate</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Funktion von PEAK3</b> .....	<b>2</b>
2.1	Überblick .....	2
2.2	Messdatenformat .....	2
<b>3</b>	<b>Bedienung von PEAK3</b> .....	<b>5</b>
3.1	PEAK3 Top-Menü .....	5
3.1.1	Exit PEAK3 .....	5
3.1.2	Show header .....	5
3.1.3	Analyse spectrum .....	5
3.1.4	Load spectrum .....	6
3.1.5	Convert spectrum to ASCII .....	6
3.1.6	Execute shell command .....	6
3.1.7	Set configuration .....	6
3.1.8	Help .....	6
3.2	PEAK3 Konfigurations-Menü .....	7
3.2.1	OK .....	7
3.2.2	Terminals and printers .....	7
3.2.3	Startup mode .....	8
3.2.4	Message mode .....	8
3.3	Graphische Ausgabe von Spektren .....	9
3.4	Peak Integration .....	12
3.5	"Hidden Lines" Darstellung von Matrizen .....	17
3.6	"Contour Plot" Darstellung von Matrizen .....	19
3.7	Drehung von Matrizen .....	21

# 1 Anleitungs-Formate

Diese Anleitung zum PEAK3-Auswerteprogramm steht in verschiedenen Formaten zur Verfügung. Die entsprechenden Files finden Sie auf dem Ionix unter `/usr/exp/ex_help` oder auf Ihrem Experiment-Account unter `$HOME/ex_home/ex_help`:

- peak3.txt    Text-Format, kann z.B. mit `a2ps` in handlichem Format gedruckt werden.
- peak3.dvi    DVI-Format, kann z.B. mit `dvips` auf einem Postscript-Drucker gedruckt werden oder mit `xdvi` auf einem X-Windows Bildschirm dargestellt werden.
- peak3.html   HTML-Format, kann mit jedem HTML-Browser (z.B. `netscape`) gelesen werden.
- peak3.info   INFO-Format, kann mit dem GNU-Info-Browser (`info -f peak3.info`) und GNU-emacs gelesen werden.
- peak3.pdf    PDF-Format, mit dem Acrobat-Reader zu lesen.

## 2 Funktion von PEAK3

### 2.1 Überblick

Das PEAK Programm ist ein allgemeines Auswerteprogramm für Vielkanal-Spektren und Matrizen im Strahlencentrumsstandard.

Es bietet folgende Funktionen an:

- Graphische Darstellung von Spektren mit Vermessungsmöglichkeit
- Graphische Darstellung von Spektren mit Peak-Integration
- "Hidden Lines" Darstellung von Matrizen
- "Contour Plot" Darstellung von Matrizen
- Rotation von Matrizen um die drei Achsen
- Ausdrucken der graphischen Darstellungen und der Integrationsergebnisse

PEAK ist zur Zeit lauffähig auf folgenden Plattformen:

- VME Experiment-Rechner-System mit VxWorks Betriebssystem
- DS5000 Workstations mit Ultrix Betriebssystem (Tutnix, Kannix, Hatnix)
- AlphaServer mit True-64-Unix Betriebssystem (Servix)
- PC mit Linux Betriebssystem (Atomix)

Als Bildschirm wird ein **VT240/330/340** Terminal, ein Unix-Host mit **xterm** oder **dxterm** oder ein PC mit **TeraTerm** benötigt.

### 2.2 Messdatenformat

#### Struktur der PEAK3-Daten-Files

Die von PEAK3 zu verarbeitenden Spektren müssen dem Strahlencentrumsstandard entsprechen d.h.:

- Sie beginnen mit einem Header von 512 Bytes Länge, der am Anfang einen standardisierten Teil enthält und anschließend noch eine Reihe weiterer, Messprogramm spezifischer Daten (z.B. Lifetime-, Realtime-Zähler usw.).
- Die Kanäle der Spektren sind als INTEGER\*4 (BYTES = 4) deklariert, d.h. jeder Kanal kann ca.  $4 \cdot 10^9$  Ereignisse aufnehmen.

```

---
|
| Header, 512 Bytes
|
---
|
| Spektrum/Matrix, (Anz. Kanäle * 4) Bytes
|
---

```

### Struktur der Header Daten:

(Beispiel für Daten des MCA-Messprogrammes)

```

#define LIDHDR 8
#define LHDLEN 1
#define LEXPMNT 6
#define LIDPRG 8
#define LSTDAT 9
#define LSTTIM 8
#define LSPDAT 9
#define LSPTIM 8
#define LSPENAM 8
#define LSPTYPE 4
#define LROWS 6
#define LCOLS 6
#define LBYTES 1
#define LHDFREE 4
#define LRESRV 38
#define LLTXT 4
#define LTEXT 80
Plattformabhängige Definitionen:
UINT2: 2 Bytes "unsigned int"
UINT4: 4 Bytes "unsigned int"

typedef union {
    struct {
        struct {
            char idhdr[LIDHDR]; /* Identification of header: "STRZ-VXW" */
            char hdlen[LHDLEN]; /* Length of header: "1" */
            char expmnt[LEXPMNT]; /* Experiment */
            char idprg[LIDPRG]; /* ID of generating Program: "MCA " */
            char stdat[LSTDAT]; /* Date of start */
            char sttim[LSTTIM]; /* Time of start */
            char spdat[LSPDAT]; /* Date of stop */
            char sptim[LSPTIM]; /* Time of stop */
            char spenam[LSPENAM]; /* Name of spectrum */

```

```

char sptype[1SPYPE]; /* Type of spectrum: "MCA1" */
char rows[1ROWS];   /* Number of rows: " 1" */
char cols[1COLS];   /* Channels/row: " <var>" */
char bytes[1BYTES]; /* Bytes/channel: "4" */
char hdfree[1HDFREE]; /* First free byte in header (0,...) */
char resrv[1RESRV]; /* Reserved */
char ltxt[1LTXT];   /* Length of text: "80" */
char text[1TEXT];  /* Text */
} stddat; /* Standard data of header */
struct {
    UINT2 status; /* Status of spectrum */
    UINT4 rltcnt; /* Realtime */
    UINT4 lftcnt; /* Lifetime */
    UINT4 datcnt; /* Processed data */
    UINT4 outcnt; /* Data out of range */
    UINT4 rejcnt; /* Rejected data */
    UINT4 fulcnt; /* Fifo full counter */
    UINT4 errcnt; /* Data error counter */
    INT4 spoffs; /* Offset in spectrum */
    UINT2 cmprss; /* Compression of spectrum */
    UINT2 hdatid; /* Data identification */
    UINT4 runtim; /* Realtime to run experiment [s] */
} spcdat; /* MCA special data of header */
} hdata; /* Header data */
struct {
    char h512[512]; /* Fill 512 bytes block */
} htotal; /* Total header */
} HEADER;

```

Der Messprogramm spezifische Datenteil des Headers wird von PEAK3 nicht ausgewertet.

## 3 Bedienung von PEAK3

Das Programm ist weitgehend selbsterklärend. Die notwendigen Eingaben werden in Dialogform angefordert. Der Dialog ist in einer Hierarchiestruktur aufgebaut, wobei mittels Menülisten von einer Dialogebene in die andere gewechselt werden kann. Für Parametereingaben existieren im Allgemeinen Vorbelegungswerte, die editiert werden können. Die graphischen Bildschirmausgaben werden durch Funktionstasteneingaben gesteuert.

### 3.1 PEAK3 Top-Menü

#### 3.1.1 Exit PEAK3

Verlassen des Programmes.

#### 3.1.2 Show header

Zeigt die wichtigsten Daten des Headers, der jedem Spektrum beigefügt ist. Es werden jedoch nur die standardisierten Daten dargestellt:

- **Experiment; Program; Spectrum**  
Name des Experimentes; Name des Programmes; Name des Spektrums.
- **Title**  
Titelzeile zur Beschreibung des Experimentes.
- **Start; Stop**  
Startzeit und -datum; Stopzeit und -datum.
- **Length**  
Anzahl Kanäle des Spektrums, bzw. Anzahl Zeilen/Spalten der Matrix.

#### 3.1.3 Analyse spectrum

Einstieg in die Darstellungs- und Peak-Integrations-Funktionen:

1. Graphische Darstellung von Spektren mit Vermessungsmöglichkeit  
(Siehe Abschnitt 3.3 [Graphische Ausgabe von Spektren], Seite 9.)
2. Graphische Darstellung von Spektren mit Peak-Integration  
(Siehe Abschnitt 3.4 [Peak-Integration], Seite 12.)
3. "Hidden Lines" Darstellung von Matrizen  
(Siehe Abschnitt 3.5 ["Hidden Lines" Darstellung von Matrizen], Seite 17.)
4. "Contour Plot" Darstellung von Matrizen  
(Siehe Abschnitt 3.6 ["Contour Plot" Darstellung von Matrizen], Seite 19.)
5. Rotation von Matrizen um die drei Achsen  
(Siehe Abschnitt 3.7 [Drehung von Matrizen], Seite 21.)

Nach dem neuen Laden von Messdaten (Load spectrum) startet PEAK3 im Falle eines Spektrums Funktion 1 und im Falle einer Matrix Funktion 3. Mit  $\sim$ D bzw.  $\sim$ I (s.u.) kann zu einer anderen Funktion gewechselt werden. Nach Rückkehr in das Hauptmenü und erneutem Aufruf von "Analyse spectrum" wird die zuvor benutzte Funktion wieder aktiviert. Mit  $\sim$ H (Control H) können die in den einzelnen Funktionen zur Verfügung stehenden Kommandos aufgelistet werden.

### 3.1.4 Load spectrum

Laden von neuen Messdaten zur Auswertung. Die Angabe des Dateinamens muss im File-Format des Host-Rechners erfolgen, z.B.  $\sim$ /ex\_home/ex\_data/test.spe für einen Unix-Host. Tilde ( $\sim$ ) und \$HOME werden als Home-Directory des zugehörigen Accounts verstanden.

### 3.1.5 Convert spectrum to ASCII

Das Spektrum wird mit oder ohne Header und mit oder ohne Kanalnummern in ASCII Form auf einen File geschrieben.

### 3.1.6 Execute shell command

Ausführung von Shell-Kommandos. Unter VxWorks (VME-Systeme) steht nur eine kleine Auswahl von Kommandos zur Verfügung.

### 3.1.7 Set configuration

Führt zum PEAK3 Konfigurations-Menü. Unter diesem Menüpunkt erfolgen alle notwendigen Anpassungen des Programmes. (Siehe  $\langle$ undefined $\rangle$  [PEAK3 Konfigurations-Menü], Seite  $\langle$ undefined $\rangle$ .)

### 3.1.8 Help

Bringt diese Anleitung über das menüorientierte GNU-INFO-Programm auf den Bildschirm. INFO läuft dabei auf einem Server (z.Z. Ionix).

Wenn INFO mit 'Q' oder 'q' normal beendet wird, dann erfolgt die direkte Rückkehr zum Messprogramm. Wird INFO jedoch mit ' $\sim$ C' abgebrochen, so bleibt das Login auf dem INFO-Server erhalten und muss mit 'exit' oder 'logout' beendet werden!

## 3.2 PEAK3 Konfigurations-Menü

Unter diesem Konfigurations-Menü erfolgen alle notwendigen Anpassungen des Programmes. Beim allerersten Start des Programmes wird dieser Menüpunkt stets automatisch aufgerufen. Danach sollte er nur noch bei Konfigurationsänderungen benutzt werden.

### 3.2.1 OK

Rückkehr zum Top-Menü.

### 3.2.2 Terminals and printers

Dieser Menüpunkt enthält ein Untermenü zum Auswählen eines passenden Terminals und Druckers bzw. zur Definition von solchen:

```
Select terminal
Select printer
Define terminal
Define printer
```

Sollte keines der Terminals oder der Drucker passend sein, so kann eines der vorhandenen Geräte angepasst werden. Dazu wird es zuerst selektiert und dann neu definiert:

Printer-Definition für einen normalen Netzwerkdrucker

```
Comment: LaserJet in 202 (hplaser)
Command: lpr -Phplaser peak3.tmp; rm peak3.tmp
File   : peak3.tmp
Select language (PS)
Select device type (Printer)
```

Printer-Definition für einen lokal am VME-Rechner angeschlossenen Drucker

```
Comment: Printer at MVME1xx Port 2
Command:
File   : /tyCo/1
Select language (HPGL)
Select device type (File)
```

Printer-Definition für einen an einem PC angeschlossenen Drucker

```
Comment: Printer at <Server>
Command: ex_home/ex_prog/PC-print <Server> <Service> <Passwort> peak3.tmp
File   : peak3.tmp
Select language (PS)
Select device type (Printer)
```

Printer-Definition für die Erzeugung von Files ohne zu drucken. Um nicht jedesmal einen neuen File-Namen definieren zu müssen, können diese in gewissen Grenzen automatisch generiert werden. Dazu können bei der Druckerdefinition im File-Namen folgende Sonderzeichen verwendet werden:

```
* wird ersetzt durch den Namen des Spektrums
$ wird ersetzt durch den "Graphic Mode" (z.B. HPGL)
# wird ersetzt durch eine fortlaufende Nummer
  (Consecutive print number), die bei der Auswahl eines
  Printers neu gesetzt werden kann.
```

Comment: ASCII files with unique names

Command:

```
File   : *.$.#
```

```
Select language (ASCII)
```

```
Select device type (FILE)
```

### 3.2.3 Startup mode

Einstellmöglichkeit zur Umgehung des Hauptmenüs beim Start durch ein anderes Programm. Das Hauptmenü kann dann nur durch Eingabe von  $\sim Z$  in einer der graphischen Funktionen erreicht werden.

### 3.2.4 Message mode

Print verbose messages:

Bei Angabe einer "1" werden ausführlichere Meldungen ausgegeben.

Delay messages:

Gelegentlich wird eine vorausgehende von einer nachfolgenden Meldung so rasch überschrieben, dass sie nicht gelesen werden kann. Hier kann für Meldungen eine Mindestverweilzeit (in Sek.) auf dem Bildschirm angegeben werden. Dies verzögert natürlich die Bedienung des Programmes und sollte deshalb nur für Testzwecke eingeschaltet werden.

### 3.3 Graphische Ausgabe von Spektren

Das Spektrum kann in vielfältiger Weise graphisch dargestellt und gedruckt werden. Mit einem Marker kann es vermessen werden.

Folgende Kommandos, die auch mit ^H online gelistet werden können, stehen zur Verfügung:

#### Exits:

CR Return to main menu	-Rückkehr zum Hauptmenü bei direktem Start von PEAK3,
CR Return to parent task	-bzw. Rückkehr zum aufrufenden Programm, falls von solchem gestartet.
^Z Return to main menu	-Rückkehr zum Hauptmenü.
^D Show matrix -> Contour Plot -> Rotate matrix -> Show spectrum	-Wechsel zu anderen Darstellungsfunktionen. Dort gibt es ein eigenes Help, das mit ^H abgerufen werden kann.
^I Peak integration	-Wechsel zur Peak-Integration. Dort gibt es ein eigenes Help, das mit ^H abgerufen werden kann.
^E Energy calibration	-Wechsel zur Energiekalibrierung. Sorry, gibt's leider noch nicht!

#### Specials:

^T Zero spectrum	-Löschen des dargestellten Spektrums,
^T Not available in this context	jedoch nur wenn PEAK3 durch ein Messprogramm gestartet wurde und die Messung nur ein "Test-Run" ist.

#### Functions:

^H Help	-Auflisten der möglichen Kommandos.
^N Normalize all parameters	-Einstellen eines Standard-Display-Parametersatzes.
^B Backup parameter set; restore with ^L	-Retten des aktuellen Display-Parametersatzes.
^L Load parameter set; saved by ^B	-Laden des zuvor geretteten Parametersatzes.
^P Print screen	-druckt den Bildschirminhalt.
^R Refresh display with fit to marker	-neuer Bildaufbau, so dass Marker sichtbar ist.
SP Refresh display	-neuer Bildaufbau.

#### Display commands:

R Shift right	-schiebt das Spektrum um 20% nach rechts.
L Shift left	-schiebt das Spektrum um 20% nach links.
E Expand X	-Dehnen der X-Achse um den Faktor 2 mit dem Vermessungsmarker als Zentrum.
C Compress X	-Stauchen der X-Achse um den Faktor 2 mit dem Vermessungsmarker als Zentrum.

U Up Y -Dehnen der Y-Achse um den Faktor 2.  
 D Down Y -Stauchen der Y-Achse um den Faktor 2.  
 N Normalize Y -Normieren des Y-Maßstabes auf den maximalen Y Wert.  
 F Full spectrum -Darstellung des ganzen Spektrums.  
 A All spectra of matrix -alle Spektren einer Matrix darstellen.  
 I Input -numerische Eingabemöglichkeit für  
     einige Darstellungsparameter.  
     X-OFFSET = X-Nullpunktverschiebung  
     LENGTH = Länge des dargestellten Ausschnitts  
     Y-OFFSET = Y-Nullpunktverschiebung (s.h. Y)

1... Number of spectrum, end with SPACE  
 -Auswahl eines Spektrums (Zeile) einer Matrix  
 durch Angabe seiner Nummer 1,2....  
 Ist die Eingabe kürzer als die max.  
 mögliche, dann mit <SPACE> abschließen.

**Display modes:**

V Vectors -Darstellung durch Vektoren.  
 P Points -Darstellung durch Punkte.  
 S Statistical errors -Fehlerbalken-Darstellung  
 H Histogram -Histogramm-Darstellung  
 X LIN/LOG mode -Lineare/logarithmische Darstellung in Y  
 T Text on/off -Ein- und Ausblenden der Markerbeschriftung  
 B Base line on/off -Ein- und Ausblenden der Nulllinie.  
 Y Y-offset on/off (LIN mode only)  
 -Bei jeder Y-Normierung (N) wird aus den  
 auftretenden Kanalinhalten ein passender  
 Y-offset berechnet, dessen Berücksichtigung  
 bei der Darstellung durch die Eingabe von Y  
 gesteuert wird. Nur für lineare Darstellung.

**Marker commands:**

<Cursor left> Shift marker left  
 <Cursor down> Shift marker fast left  
     -Linksschieben des Markers, maximal bis zum  
     linken Nachbarn.  
 <Cursor right> Shift marker right  
 <Cursor up> Shift marker fast right  
     -Rechtsschieben des Markers, maximal bis zum  
     rechten Nachbarn.  
 < Shift marker fast left -Falls die verwendete Terminalemulation  
 > Shift marker fast right Probleme mit den Cursor-Tasten hat, können  
     diese beiden Kommandos helfen. Bei aus-  
     reichendem Spreizen des Spektrums können  
     einzelne Kanäle erreicht werden.  
 T Flag on/off -Ein- und Ausblenden der Markerbeschriftung

Kanäle und Spektren zählen von 1.

Alle Kommandos können während des laufenden Bildaufbaus gegeben werden. Dieser wird dadurch unterbrochen und das neue Kommando ausgeführt.

### 3.4 Peak Integration

Beim Start der Peak-Integrationsfunktion werden zunächst numerisch die Position des Peaks, sowie relativ zu dieser, die 6 Integrationsgrenzen angefordert. Als Vorbelegung werden die Werte aus einer vorangegangenen Auswertung angeboten oder für die Peak-Lage die Position des Vermessungs-Markers der eventuell zuvor genutzten Spektren-Darstellungsfunktion. Anschließend wird das Spektrum graphisch so am Bildschirm dargestellt, dass alle Integrationsgrenzen zu sehen sind, falls sie nicht außerhalb des Spektrums liegen (im  $\hat{J}$ -Modus bleibt die Länge des Spektrumausschnittes jedoch unverändert, auch wenn dabei nicht alle Grenzen im Bild erscheinen). Bildausschnitt und Integrationsgrenzen können danach noch beliebig verändert werden (s.u.). Die Marker werden mit den Cursor-Tasten verschoben. Ist der Peak-Marker (M0) aktiv, so wird das ganze Marker-Paket simultan verschoben. Ist ein Integrations-Marker (M1...M6) aktiv, so wird nur dieser bewegt.

#### Untergrund- und Peak-Grenzen:

Die 6 Marker für den linken und rechten Untergrund sowie den zu integrierenden Peak können nur genau auf einen Kanal des Spektrums positioniert werden und nicht dazwischen (wie in der alten PDP11-Version). Benachbarte Marker können sich nicht überkreuzen, wohl aber auf den gleichen Kanal positioniert sein. Die Integrationsgrenzen reichen einschließlich der Kanäle auf denen die Marker positioniert sind von:

M1 - M2	linker Untergrund
M3 - M4	Peak
M5 - M6	rechter Untergrund

Wird in einer Matrix von einem Spektrum zu einem anderen geschaltet, so wandern die Grenzen mit zu der entsprechenden Position in dem neuen Spektrum.

#### Untergrundbestimmung:

Der Untergrund wird linear angenähert. Zur Berechnung der Untergrundgeraden werden zwei verschiedene Verfahren angewendet, die bei unproblematischen Peaks zu etwa gleichen Ergebnissen führen. Bei Problemfällen (nichtlinearer Untergrund, Doppelpeaks usw.) können wesentliche Unterschiede auftreten, so dass nur eine Begutachtung der beiden Untergrundgeraden am Bildschirm (mittels  $\hat{A}$ ) zu brauchbaren Ergebnissen führen kann. Für den Fall, dass rechter und linker Untergrundbereich jeweils nur aus einem Kanal bestehen, liefern beide Verfahren identische Ergebnisse.

#### *Verfahren 1: (Untergrund-Fit)*

An die Kanäle des linken und rechten Untergrundes zusammen wird eine Gerade gefittet. Hierzu wird ein ungewichteter 'least-squares-fit' verwendet, da ein gewichteter Fit nicht flächentreu ist, und die Chi-Quadrat-Korrektur (BEV, S248) nur für die beteiligten Kanäle, nicht jedoch für die Untergrundfläche unter dem Peak gültig ist. Ferner stammen bei Vorliegen eines nahezu horizontalen Untergrundes die Kanalinhalt ohnehin aus der gleichen statistischen Gesamtheit, so dass ein ungewichteter Fit für einen solchen Fall eher geeignet ist.

#### Fehlerrechnung

Es werden zwei Fehlerrechnungen durchgeführt und der größte der beiden Fehler für weitere Berechnungen verwendet.

- Fehler 1: Unter der Annahme einer Poisson-Verteilung der beteiligten Kanalinhalt, wird als Varianz das Mittel der beteiligten Kanalinhalt genommen.

- Fehler 2: Über die Fehlerquadratsumme wird (falls ausreichend Freiheitsgrade vorhanden) die tatsächliche Varianz der beteiligten Kanalinhalt bestimmt.

In beiden Fällen wird anschließend eine Fehlerfortpflanzung von den Kanälen zu den Geradenparametern gerechnet. Fehler 1 kommt zum Tragen, wenn insbesondere bei wenig Freiheitsgraden die Kanäle zufällig sehr dicht bei der Geraden liegen. Fehler 2 dominiert, wenn der Untergrund durch systematische Abweichungen wie Comptonkanten sich von einer Geraden unterscheidet.

*Verfahren 2: (Canberra-Untergrund (CAN S.33))*

Der rechte und der linke Untergrund werden jeweils getrennt für sich in X und Y gemittelt (ungewichtet). Durch die so erhaltenen zwei Punkte wird die Untergrundgerade gelegt.

Fehlerrechnung

Für dieses Verfahren werden ebenfalls zwei Fehler aus rechnerischer und tatsächlicher Varianz berechnet und der größte weiter verwertet.

- Fehler 1: Unter der Annahme einer Poisson-Verteilung ergibt sich als Varianz für linken und rechten Untergrund der jeweilige Mittelwert der Kanalinhalt. Durch Fehlerfortpflanzung werden daraus der Fehler des linken bzw. rechten Untergrundstützpunktes berechnet. Die Fehler der Geradenparameter ergeben sich durch Fehlerfortpflanzung aus den Fehlern beider Stützpunkte.
- Fehler 2: Für linken und rechten Untergrund getrennt wird die tatsächliche Varianz durch die Fehlerquadratsumme bezüglich der Untergrundgeraden bestimmt. Dann wird wie bei Fehler 1 verfahren.

#### **Berechnung der Peakfläche:**

Die Brutto-Peakfläche wird berechnet durch Aufaddieren aller Kanäle innerhalb der Peakgrenzen. Zur Ermittlung der beiden Netto-Peakflächen werden die durch die beiden Untergrundgeraden gegebenen Flächen unter dem Peak abgezogen.

Fehlerrechnung

Um die Fehlerrechnung zu vereinfachen wurde der Nullpunkt der X-Achse für die beiden Untergrundgeraden  $y=A+Bx$  in die Mitte des Peakbereiches gelegt. Dann berechnet sich die Untergrundfläche lediglich aus dem Achsabschnitt A und Korrelationsprobleme zwischen A und B treten bei der Fehlerrechnung nicht auf. Der Fehler der Nettofläche ergibt sich dann nach üblicher Fehlerfortpflanzung zu Wurzel aus der Summe von Bruttofläche und dem Fehlerquadrat der Untergrundfläche.

#### **Berechnung von Peak-Schwerpunkt, -Breite und -Schiefe:**

Der Schwerpunkt (Center) wird nach Abzug des Untergrundes (Untergrund-Fit) durch gewichtete Mittelung innerhalb der Peakgrenzen gebildet.

Die Breite (Width) des Peaks wird aus der Streuung um den Schwerpunkt errechnet (quadratisches Moment) und entspricht der Halbwertsbreite (FWHM).

Als Schiefe (Skew) des Peaks wird das Verhältnis von kubischem Moment geteilt durch die Breite hoch 3 angegeben, ist also eine dimensionslose Angabe relativ zur Breite. Für einen symmetrischen Peak ist sie null, bei niederenergetischem Schwanz negativ und bei höherenergetischem positiv.

Die Fehler werden durch Fehlerfortpflanzung aus den beteiligten Kanalinhalt berechnet. Der Fehler der Untergrundgeraden ist dabei vernachlässigt.

Breite, Schiefe und deren Fehler lassen sich nicht immer berechnen (negative Wurzelargumente bei schlecht passendem Untergrund) und werden dann mit null ausgegeben.

BEV: P. R. Bevington; Data Reduction and Error Analysis  
 BRA: S. Brandt; Statistische Methoden der Datenanalyse  
 CAN: Canberra Katalog 81-82

Folgende Kommandos, die auch mit ^H online gelistet werden können, stehen zur Verfügung:

#### Exits:

CR Return to main menu -Rückkehr zum Hauptmenü bei direktem Start von PEAK3,  
 CR Return to parent task -bzw. Rückkehr zum aufrufenden Programm, falls von solchem gestartet.  
 ^Z Return to main menu -Rückkehr zum Hauptmenü.  
 ^D Show spectrum -> Show matrix -> Contour Plot -> Rotate matrix  
 -Wechsel zu anderen Darstellungsfunktionen. Dort gibt es ein eigenes Help, das mit ^H abgerufen werden kann.

#### Specials:

^T Zero spectrum -Löschen des dargestellten Spektrums,  
 ^T Not available in this context jedoch nur wenn PEAK3 durch ein Messprogramm gestartet wurde und die Messung nur ein "Test-Run" ist.

#### Functions:

^H Help -Auflisten der möglichen Kommandos.  
 ^N Normalize all parameters -Einstellen eines Standard-Display-Parametersatzes.  
 ^B Backup parameter set; restore with ^L  
 -Retten des aktuellen Display-Parametersatzes.  
 ^L Load parameter set; saved by ^B  
 -Laden des zuvor geretteten Parametersatzes.  
 ^I Short results on terminal -schreibt das Integrations-Ergebnis in das Spektrum, zeichnet die Untergrundgerade.  
 ^F Full results on terminal -Der Peak wird integriert und alle Ergebnisse werden alphanumerisch auf das Terminal ausgegeben.  
 ^P Print screen -druckt den Bildschirminhalt, also Spektrum oder Integrations-Ergebnis.  
 ^R Refresh display with fit to markers  
 -neuer Bildaufbau, so dass alle Marker sichtbar sind.  
 SP Refresh display -neuer Bildaufbau für Spektrum, bzw. neue Peak-Integration nach ^F.  
 ^A Show alternate background -Wechsel zwischen den beiden Untergrundgeraden. Der aktuelle Untergrund wird durch \* bei

der numerischen Ausgabe markiert. (Nach ^I)

#### Display commands:

R	Shift right	-schiebt das Spektrum um 20% nach rechts.
L	Shift left	-schiebt das Spektrum um 20% nach links.
E	Expand X	-Dehnen der X-Achse um den Faktor 2 mit dem Peak-Marker als Zentrum.
C	Compress X	-Stauen der X-Achse um den Faktor 2 mit dem Peak-Marker als Zentrum.
U	Up Y	-Dehnen der Y-Achse um den Faktor 2.
D	Down Y	-Stauen der Y-Achse um den Faktor 2.
N	Normalize Y	-Normieren des Y-Maßstabes auf den maximalen Y Wert.
F	Full spectrum	-Darstellung des ganzen Spektrums.
A	All spectra of matrix	-alle Spektren einer Matrix darstellen.
I	Input	-numerische Eingabemöglichkeit für die Integrationsgrenzen.
1...	Number of spectrum, end with SPACE	-Auswahl eines Spektrums (Zeile) einer Matrix durch Angabe seiner Nummer 1,2.... Ist die Eingabe kürzer als die max. mögliche, dann mit <SPACE> abschließen.

#### Display modes:

V	Vectors	-Darstellung durch Vektoren.
P	Points	-Darstellung durch Punkte.
S	Statistical errors	-Fehlerbalken-Darstellung
H	Histogram	-Histogramm-Darstellung
X	LIN/LOG mode	-Lineare/logarithmische Darstellung in Y
T	Text on/off	-Ein- und Ausblenden der Markerbeschriftung
B	Base line on/off	-Ein- und Ausblenden der Nulllinie.
Y	Y-offset on/off (LIN mode only)	-Bei jeder Y-Normierung (N) wird aus den auftretenden Kanalinhalten ein passender Y-offset berechnet, dessen Berücksichtigung bei der Darstellung durch die Eingabe von Y gesteuert wird. Nur für lineare Darstellung.

#### Marker commands:

M1...M6	Select marker 1...6	-Die Markerpositionierungseingaben wirken nur auf den gerade aktiven Marker. Mit diesem Kommando wird einer der sechs Marker (von links gezählt) zum aktiven Marker erklärt. Achtung, mehrere Marker können an der gleichen Position übereinanderliegen.
M<	Select next marker left	-Marker links vom aktiven Marker wird zum neuen aktiven Marker.
M>	Select next marker right	-Marker rechts vom aktiven Marker wird zum

neuen aktiven Marker.

MM Same as M> -Wie M>

<Cursor left> Shift current marker left

<Cursor down> Shift current marker fast left  
-Linksschieben des aktiven Markers, maximal bis zum linken Nachbarn.

<Cursor right> Shift current marker right

<Cursor up> Shift current marker fast right  
-Rechtsschieben des aktiven Markers, maximal bis zum rechten Nachbarn.

< Shift current marker fast left

> Shift current marker fast right  
-Falls die verwendete Terminalemulation Probleme mit den Cursor-Tasten hat, können diese beiden Kommandos helfen. Bei ausreichendem Spreizen des Spektrums können einzelne Kanäle erreicht werden.

MS Save current marker positions to spectrum  
-Die aktuellen Markerpositionen werden im Header des Spektrums abgespeichert und stehen bei einem erneuten Laden des Spektrums durch PEAK3 wieder zu Verfügung.

T Flag on/off -Ein- und Ausblenden der Markerbeschriftung

^J A. Jung special mode on/off  
-Bei Eingabe einer neuen Peakposition erfolgt keine neue Normierung des Bildausschnittes.

Kanäle und Spektren zählen von 1.

Alle Kommandos können während des laufenden Bildaufbaus gegeben werden. Dieser wird dadurch unterbrochen und das neue Kommando ausgeführt.

**Achtung:**

Falls die Spektrenanalyse auf eine laufende Messung erfolgt, darf es nicht verwundern, wenn man bei jeder Integration ein neues Ergebnis erhält, auch wenn der Bildschirm immer das gleiche Bild zeigt, weil die Darstellung nicht erneuert wurde!

### 3.5 "Hidden Lines" Darstellung von Matrizen

Diese Funktion erlaubt verschiedene Darstellungen von Matrizen z.B. verschiedene Blickwinkel und verdeckte Linien.

Folgende Kommandos, die auch mit ^H online gelistet werden können, stehen zur Verfügung:

#### Exits:

CR Return to main menu            -Rückkehr zum Hauptmenü bei direktem Start von PEAK3,  
 CR Return to parent task        -bzw. Rückkehr zum aufrufenden Programm, falls von solchem gestartet.  
 ^Z Return to main menu        -Rückkehr zum Hauptmenü.  
 ^D Contour Plot -> Rotate matrix -> Show spectrum -> Show matrix  
                                   -Wechsel zu anderen Darstellungsfunktionen. Dort gibt es ein eigenes Help, das mit ^H abgerufen werden kann.

#### Specials:

^T Zero spectrum                -Löschen der dargestellten Matrix,  
 ^T Not available in this context jedoch nur wenn PEAK3 durch ein Messprogramm gestartet wurde und die Messung nur ein "Test-Run" ist.

#### Functions:

^H Help                         -Auflisten der möglichen Kommandos.  
 ^N Normalize all parameters   -Einstellen eines Standard-Display-Parametersatzes.  
 ^B Backup parameter set; restore with ^L  
                                   -Retten des aktuellen Display-Parametersatzes.  
 ^L Load parameter set; saved by ^B  
                                   -Laden des zuvor geretteten Parametersatzes.  
 ^P Print screen                -druckt den Bildschirminhalt.  
 ^R Refresh display            -neuer Bildaufbau.  
 SP Refresh display            -neuer Bildaufbau.

#### Display commands:

E Expand matrix                -Vermehren der Matrixpunkte um den Faktor 4 durch Auflösen je zweier zuvor zusammengefasster benachbarter Zeilen und Spalten.  
 C Compress matrix            -Reduzieren der Matrixpunkte um den Faktor 4 durch Zusammenfassen je zweier benachbarter Zeilen und Spalten.  
 U Up Z                         -Dehnen der Z-Achse um den Faktor 2.  
 D Down Z                       -Stauchen der Z-Achse um den Faktor 2.  
 N Normalize Z                 -Normieren des Z-Maßstabes auf den maximalen Z Wert.

#### Cursor control keys:

<Cursor Right> Increase isometric shift X

```

                                -Vergrößert die seitliche Verschiebung
                                der Zeilen gegeneinander.
Cursor Left>  Decrease isometric shift X
                                -Verkleinert die seitliche Verschiebung
                                der Zeilen gegeneinander.
<Cursor Up>   Increase isometric shift Y
                                -Vergrößert den Abstand der Zeilen.
<Cursor Down> Decrease isometric shift Y
                                -Verkleinert den Abstand der Zeilen.

```

**Display modes:**

```

M Plot mode: -> Lines plot -> Surface plot -> Grid plot ->
                                -Darstellungsart:
                                Liniendarstellung
                                Oberflächendarstellung
                                Gitterdarstellung
H Hidden lines: -> no -> upper -> lower -> both surfaces ->
                                -Verdeckte Linien Modus
                                keine verdeckten Linien
                                nur Oberseite sichtbar
                                nur Unterseite sichtbar
                                beide Seiten sichtbar
X LIN/LOG mode -Lineare/logarithmische Darstellung in Z
T Text on/off -Ein- und Ausblenden des Textes.

```

Kanäle und Spektren zählen von 1.

Alle Kommandos können während des laufenden Bildaufbaus gegeben werden. Dieser wird dadurch unterbrochen und das neue Kommando ausgeführt.

### 3.6 "Contour Plot" Darstellung von Matrizen

Graphische Darstellung von Matrizen im Höhenlinienformat. Angepasst an das jeweilige Ausgabegerät stehen 2 - 16 Farben bzw. Graustufen zur Darstellung zur Verfügung. Ein Ausdruck entspricht deshalb in den Farben nicht unbedingt der Darstellung auf dem Bildschirm.

Folgende Kommandos, die auch mit ^H online gelistet werden können, stehen zur Verfügung:

#### Exits:

CR Return to main menu            -Rückkehr zum Hauptmenü bei direktem Start von PEAK3,  
 CR Return to parent task        -bzw. Rückkehr zum aufrufenden Programm, falls von solchem gestartet.  
 ^Z Return to main menu         -Rückkehr zum Hauptmenü.  
 ^D Rotate matrix -> Show spectrum -> Show matrix -> Contour Plot  
                                   -Wechsel zu anderen Darstellungsfunktionen. Dort gibt es ein eigenes Help, das mit ^H abgerufen werden kann.

#### Specials:

^T Zero spectrum                 -Löschen des bearbeiteten Spektrums,  
 ^T Not available in this context jedoch nur wenn PEAK3 durch ein Messprogramm gestartet wurde und die Messung nur ein "Test-Run" ist.

#### Functions:

^H Help                            -Auflisten der möglichen Kommandos.  
 ^N Normalize all parameters    -Einstellen eines Standard-Display-Parametersatzes.  
 ^B Backup parameter set; restore with ^L  
                                   -Retten des aktuellen Display-Parametersatzes.  
 ^L Load parameter set; saved by ^B  
                                   -Laden des zuvor geretteten Parametersatzes.  
 ^P Print screen                 -druckt den Bildschirminhalt.  
 ^R Refresh display             -neuer Bildaufbau.  
 SP Refresh display             -neuer Bildaufbau.

#### Display commands:

E Expand matrix                 -Vermehren der Matrixpunkte um den Faktor 4 durch Auflösen je zweier zuvor zusammengefasster benachbarter Zeilen und Spalten.  
 C Compress matrix             -Reduzieren der Matrixpunkte um den Faktor 4 durch Zusammenfassen je zweier benachbarter Zeilen und Spalten.  
 U Up Z                         -Dehnen der Z-Achse um den Faktor 1.2.  
 D Down Z                        -Stauchen der Z-Achse um den Faktor 1.2.



### 3.7 Drehung von Matrizen

Mit dieser Funktion koennen Matrizen um die drei Achsen rotiert werden.

Folgende Kommandos, die auch mit ^H online gelistet werden koennen, stehen zur Verfuigung:

#### Exits:

CR Return to main menu	-Rückkehr zum Hauptmenü bei direktem Start von PEAK3,
CR Return to parent task	-bzw. Rückkehr zum aufrufenden Programm, falls von solchem gestartet.
^Z Return to main menu	-Rückkehr zum Hauptmenü.
^D Show spectrum -> Show matrix -> Contour Plot -> Rotate matrix	-Wechsel zu anderen Darstellungsfunktionen. Dort gibt es ein eigenes Help, das mit ^H abgerufen werden kann.

#### Specials:

^T Zero spectrum	-Löschen der dargestellten Matrix,
^T Not available in this context	jedoch nur wenn PEAK3 durch ein Messprogramm gestartet wurde und die Messung nur ein "Test-Run" ist.

#### Functions:

^H Help	-Auflisten der möglichen Kommandos.
^N Normalize all parameters	-Einstellen eines Standard-Display-Parametersatzes.
^B Backup parameter set; restore with ^L	-Retten des aktuellen Display-Parametersatzes.
^L Load parameter set; saved by ^B	-Laden des zuvor geretteten Parametersatzes.
^P Print screen	-druckt den Bildschirminhalt.
^R Refresh display	-neuer Bildaufbau.
SP Refresh display	-neuer Bildaufbau.

#### Display commands:

E Expand matrix	-Vermehren der Matrixpunkte um den Faktor 4 durch Auflösen je zweier zuvor zusammengefasster benachbarter Zeilen und Spalten.
C Compress matrix	-Reduzieren der Matrixpunkte um den Faktor 4 durch Zusammenfassen je zweier benachbarter Zeilen und Spalten.
U Up Z	-Dehnen der Z-Achse um den Faktor 2.
D Down Z	-Stauen der Z-Achse um den Faktor 2.
N Normalize Z	-Normieren des Z-Maßstabes auf den maximalen Z Wert.
1 Rotate X-axis	-Rotieren um die X-Achse
2 Rotate Y-axis	-Rotieren um die Y-Achse
3 Rotate Z-axis	-Rotieren um die Z-Achse

**Display modes:**

X	LIN/LOG mode	-Lineare/logarithmische Darstellung in Z
T	Text on/off	-Ein- und Ausblenden des Textes.

Kanäle und Spektren zählen von 1.

Alle Kommandos können während des laufenden Bildaufbaus gegeben werden. Dieser wird dadurch unterbrochen und das neue Kommando ausgeführt.