Calibrazione e riduzione degli spettri acquisiti a Medicina

Riccardo Cesaroni

October 6, 1994

La riduzione degli spettri di Medicina può essere effettuata sulle SUN workstation dell'Osservatorio di Arcetri sia mediante il programma DRAW2 del package TOOLBOX sviluppato al MPIfR di Bonn sia con il programma CLASS del package GAG sviluppato all'IRAM e Osservatorio di Grenoble.

Il presente manuale ha lo scopo di descrivere la procedura per selezionare gli spettri desiderati nel formato preferito (CLASS o DRAW2) e descrivere molto brevemente una tipica sessione di riduzione dati col programma CLASS. Esula invece dai nostri scopi una descrizione del programma DRAW2 per il quale si rimanda al relativo manuale d'uso.

E' importante dire sin da ora che *nessuno* dei comandi descritti nel seguito può funzionare senza un'opportuna modifica del file ".cshrc". E' infatti necessario aggiungere al path di ricerca dei comandi le directories "/home/thor1/bin gaguser/gag/bin".

1 Selezione degli spettri desiderati (programma CALIB)

Allo scopo di rendere più semplice il procedimento per la selezione degli spettri di interesse, è stato approntato il comando "calib" che, a partire da un file contenente i numeri di scan desiderati, crea un altro file contenente gli spettri corrispondenti o in formato TOOLBOX o formato CLASS. I dati vengono automaticamente calibrati usando la consueta curva di calibrazione. In pratica chi voglia usare tale comando dovrà fare quanto segue:

1. creare un file di nome qualunque ed estensione ".lis", per esempio "spettri.lis"; tale file deve contenere i numeri degli scans voluti, uno per ogni riga (in prima colonna, se il file è a più colonne)
2. dare il comando (nell'esempio precedente)
   calib spettri tool
   per creare il file "spettri.cor" in formato TOOLBOX, oppure
   calib spettri class
   per generare il file "spettri.med" in formato CLASS.

2 Riduzione degli spettri (programma CLASS)

Supponiamo di avere il file "spectra.med" contenente degli spettri presi a Medicina, già calibrati (con "calib" per esempio), ma ovviamente non ancora ridotti. Immaginiamo di voler ridurre lo scan numero 1234. Innanzitutto si deve entrare in ambiente CLASS con il comando "class", dato ovviamente sotto UNIX, e poi definire la device grafica

su cui vogliamo plottare gli spettri: per vedere l'elenco delle devices utilizzabili dare il comando
`device ?`
In pratica conviene lavorare in ambiente X11 il comporta la scelta della device corrispondente ovvero
`device xl b`
Conviene inoltre definire alcune caratteristiche dell'ambiente di lavoro con i comandi
```
set cursor on
set calibration off
```

Fatto questo, si può cominciare la fase di riduzione vera e propria. Supponiamo di voler rimuovere la baseline, fittare 3 righe e memorizzare lo spettro così ottenuto in un file di output. Prima di tutto bisognerà aprire il file contenente gli spettri con
`file in spectra.med`
e quello di output (ovviamente non necessario se non si vogliono memorizzare gli spettri ridotti) con
`file out spectra.red`
se il file "spectra.red" esiste già, oppure
`file out spectra.red new`
se il file è nuovo. Si cercano quindi tutti gli scans in esso contenuti con
`find/all`
Si può ora caricare in memoria lo spettro voluto con
`get 1234`
e visualizzarlo con
`plot`

Nel caso si vogliano sommare più spettri della stessa sorgente (per es. W3 oh), si daranno invece i comandi
set source "W3 oh"
```
find/all
sum
plot
```

Se lo spettro dovesse apparire in una "finestra" torppo piccola, dare il comando
`set mode x tot`
Se invece il range in velocità è troppo grande, basta dare il comando
`set mode x`
e fissare con il cursore (battendo la space-bar) i limiti voluti. A questo punto si devono fissare il range su cui fittare la baseline: **attenzione:** a differenza di DRAW2, si devono indicare la zona (o le zone) dello spettro in cui *non* si vuole fittare la baseline: in altre parole, se per esempio si ha una riga nello spettro bisogna fissare i due punti ai piedi della riga. Ciò si ottiene con il comando
`set window`
che mostra il cursore: quindi ci si sposta nei punti voluti e si batte un tasto qualunque (per es. la space-bar) così come in TOOLBOX si batteva il tasto "B". Una volta terminato (il numero di punti battuti deve ovviamente essere un numero pari) si esce battendo il tasto "E". Per fittare una baseline per es. di quarto grado, visualizzare il fit e rimuovere la baseline si dà il comando

`base 4/plot`
Se il fit non è soddisfacente si può recuperare lo spettro immediatamente precedente al fit stesso con
`swap`
e quindi provare con una baseline diversa. Una volta ottenuto un fit accettabile, per vedere lo spettro con la baseline rimossa dare il comando
`plot`

A questo punto lo spettro potrebbe già essere scritto nel file di output come spiegato qui di seguito, ma supponiamo di voler prima fittare le righe (fino ad un massimo di 5). Se per esempio le righe sono 3, si usa il comando
`line 3`
e si usa il cursore per fissare per ogni riga i 2 punti corrispondenti al suo livello di zero (i "piedi" della riga). Al solito si usa la space-bar per segnare ogni punto e si batte "E" per terminare. Il comando
`gauss`
effettua il fit, che viene visualizzato con
`fit`
Lo spettro con baseline rimossa e fit incorporato viene infine scritto nel file di output con
`write`

Volendo recuperare il risultato del fit, bisognerà (una volta conclusa la riduzione di tutti gli spettri) aprire in input quello che era il file di output con il comando

```
file in spectra.red
find/all
```

e quindi scrivere tutti i fit in un file a scelta, per es. spectra.par, con
`print fit/out spectra.par`

Una volta finito si esce da CLASS con
`exit`

Vale solo la pena di aggiungere che si può ottenere una copia su carta con
`hardcopy/plot`
che stampa esattamente *solo* ciò che si vede nella finestra grafica.

Ci sarebbero innumerevoli altre caratteristiche da illustrare, ma per questo è già stato scritto il manuale... Tale manuale è reperibile nella directory /home/thor1/gaguser/manuals/class/ come file class.dvi (91 pagine). Inoltre esiste un ottimo HELP on-line molto chiaro e di uso intuitivo. Alcuni utili comandi sono `list`, `draw` e `set`.

Per chi volesse farsi un'idea di come si scrive una procedura in CLASS o comunque automatizzare la riduzione dati, esistono due procedure nella directory " cesa/gag/". La prima (base.class) permette di rimuovere la baseline da *tutti* gli spettri contenuti in un file dato e memorizzare il risultato in un file nuovo. La seconda (fit.class) permette di fittare *tutti* gli spettri contenuti in tale file. Per usarle basta digitare (dentro CLASS, ovviamente) prima il comando
`@base spectra`
e poi

```
@fit spectra
```

La prima procedura assume che il file in input abbia estensione ".med" e genera un file con estensione ".bsl" (spectra.bsl, nell'esempio). La seconda richiede in input un file con estensione ".bsl" e ne crea uno con estensione ".red" (spectra.red, nell'esempio).