

B-928

1065/2-77

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



21/3-77

10 - 10248

В.Я.Выропаев, В.Б.Злоказов, Л.П.Кулькина,
О.Д.Маслов, Б.В.Фефилов

К ВОПРОСУ О ПРИМЕНЕНИИ ЭВМ
В АКТИВАЦИОННОМ АНАЛИЗЕ

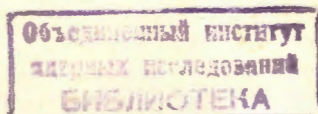
1976

10 - 10248

В.Я.Выропаев, В.Б.Злоказов, Л.П.Кулькина,
О.Д.Маслов, Б.В.Фефилов

К ВОПРОСУ О ПРИМЕНЕНИИ ЭВМ
В АКТИВАЦИОННОМ АНАЛИЗЕ

Направлено в АЭ



Выропаев В.Я. и др.

10 - 10248

К вопросу о применении ЭВМ в активационном анализе

В работе описан программный комплекс для обработки гамма-спектров при инструментальном активационном анализе многокомпонентных объектов. Приводится блок-схема различных вариантов связи с ЭВМ; рассмотрена возможность использования мини-ЭВМ в качестве анализатора и для предварительной обработки гамма-спектров.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1976

© 1976 Объединенный институт ядерных исследований Дубна

Расшифровка и обработка спектров гамма-излучения является наиболее трудоемкой задачей в активационном анализе сложных многокомпонентных объектов. При получении гамма-спектров с помощью Ge(Li) детекторов больших объемов и с высокой разрешающей способностью для полного извлечения информации наиболее целесообразным представляется использование ЭВМ, а в случае массового многоэлементного инструментального анализа это является единственно возможным решением.

В Лаборатории ядерных реакций разработан комплекс электронной аппаратуры и программное обеспечение для автоматизации измерения и обработки спектрометрической информации, в том числе сложных гамма-спектров, полученных с помощью полупроводниковых детекторов.

На рис. 1 представлена блок-схема такого измерительно-вычислительного комплекса. Измерительная электронная аппаратура включает в себя Ge(Li) детекторы с различным чувствительным объемом /30-60 см³ / и энергетическим разрешением порядка 2-3,5 кэВ для линии ⁶⁰Co / E_γ=1333 кэВ/, зарядо-чувствительный преобразователь, линейный усилитель и амплитудно-цифровой преобразователь на 4096 каналов с частотой квантования 100 МГц. Интегральная нелинейность измерительно-преобразовательного тракта - не хуже 0,05%, долговременная стабильность в нормальных лабораторных условиях - не хуже ±1,5 канала для пика в конце энергетической шкалы в течение суток. При необходимости имеется возможность стабилизации по реперным пикам или по импульсам стабильного импульсного генератора.

Для интегрального накопления гамма-спектров используются многоканальный анализатор АИ-4096 или

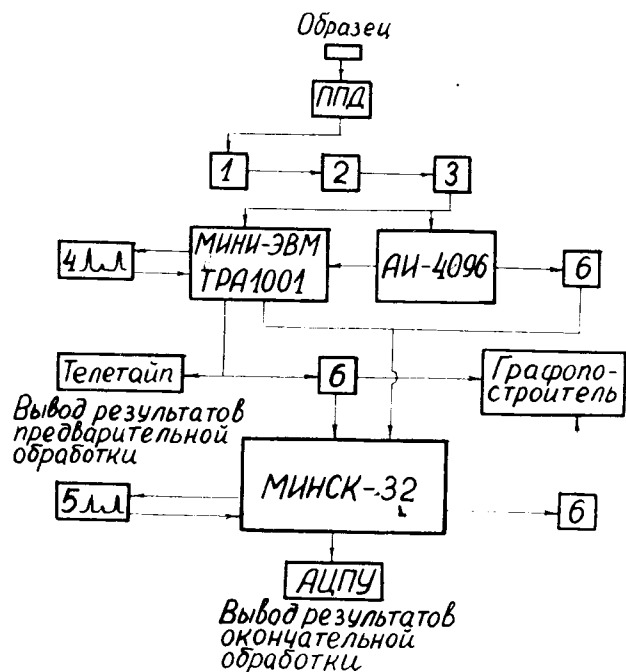


Рис. 1. Блок-схема различных вариантов обеспечения измерений и обработки гамма-спектров активированных проб. 1 - предусилитель, 2 - усилитель с активным формированием, 3 - аналого-цифровой преобразователь, 4, 5 - дисплей, 6 - перфоратор.

мини-ЭВМ ТРА-1001, а вывод данных производится на перфоратор ПЛ-150. Полученные перфоленты вводятся в ЭВМ "Минск-32" для обработки или распечатываются в виде гистограмм на графопостроителе ДРП-3 при помощи фотосчитывающего устройства FS-1501 и устройства управления УП-7. Комплекс анализаторов АИ-4096 /5 шт./ связан с ЭВМ "Минск-32" стандартным каналом ввода-вывода с помощью специально разработанного устройства сопряжения.

Мини-ЭВМ ТРА-1001 имеет ОЗУ 16К 12-разрядных слов, интерфейс связи с АЦП и осциллографический дисплей с двумя управляемыми маркерами. Мини-ЭВМ может быть использована и для окончательной обработки сравнительно простых спектров по программе "ЮПИТЕР-16" /1/, которая дает возможность с помощью дисплея идентифицировать фотопики, определять их площади и разрешение, а также размечать сложные спектры, для окончательной обработки которых используется ЭВМ "Минск-32" /2/.

Неотъемлемой частью комплекса обработки является точечный дисплей со световым карандашом, специально разработанный для ЭВМ "Минск-32".

На базе ЭВМ "Минск-32" создан программный комплекс обработки гамма-спектров для целей инструментального активационного анализа. Принцип организации математической обработки гамма-спектров, как основы для проведения активационного анализа, может быть использован и в других экспериментах при работе с гамма-спектрами. Основа программного комплекса - спектроориентированная система СПОРС /3/, дающая экспериментатору простой и удобный аппарат для взаимодействия с программами обработки спектров.

Гамма-спектр, зарегистрированный многоканальным амплитудным анализатором, трактуется как сумма трех компонент:

$$S(x) = \sum_{i=1}^n A_i p_i(x) + B(x) + \delta(x),$$

где $A_i p_i(x)$ - i -ый пик полного поглощения энергии гамма-квантов; $B(x)$ - фоновая составляющая /включая края комптоновского рассеяния, пики утечки и другие вклады всевозможных непрерывных распределений энергии в детекторе/; $\delta(x)$ - статистическая ошибка /ошибки в разных каналах считаются независимыми/.

Под обработкой гамма-спектров понимается разложение его на вышеупомянутые компоненты и статистическая оценка параметров этих компонент, осуществляемые с помощью метода наименьших квадратов; при этом основной интерес представляют оценки параметров по-

лезных компонент, таких, как площадь, полуширина и положение пиков полного поглощения энергии, а также их ошибки.

В качестве модели пика полного поглощения может быть задана любая кривая, достаточно полно описывающая его форму /4/. В качестве исходной информации для получения такой кривой используется, например, табличная распечатка /поканально/ участка гамма-спектра с изолированным фотопиком, полученного с помощью используемого в эксперименте спектрометрического тракта. Эта информация в виде массива чисел вводится в ЭВМ. Гауссовская кривая формируется автоматически. Фон моделируется полиномами Чебышева.

В описываемый комплекс входит математическое обеспечение дисплея со спектрометрической ориентацией. Дисплей используется для разметки фотопиков и оптимальных границ участков при математической обработке. При визуальном рассмотрении спектра с помощью дисплея можно определить энергию любого фотопика. При наличии дисплея отпадает необходимость введения дополнительной информации для моделирования кривой, описывающей форму фотопика. Необходимо в первую очередь разметить пик, выбранный для модели.

С целью преобразования результатов математической обработки спектра в физические единицы измерений в ЭВМ вводятся данные для энергетической калибровки и учета эффективности детектора.

Использование библиотеки изотопов /в пакетном режиме/ дает возможность получения расчетных данных как по относительному /по эталонам/, так и по абсолютному /по формуле активации/ методам активационного анализа. Расчеты выполняются по всем присутствующим в спектре линиям данного изотопа, что является дополнительным контролем точности анализа. В настоящее время составлена библиотека для 126 изотопов с ориентацией на (n, γ) -реакцию.

Конечный результат обработки - данные об элементном составе пробы / в г/г/ с указанием точности определения. Ошибка оценивается с учетом вклада точности как математической обработки, так и самого ме-

тода анализа. Так, в наших экспериментах, ошибка определения элементного состава абсолютным методом составляет 10-12%, относительным - 4-6%.

В программный комплекс входит также математическое обеспечение для рисования гамма-спектров с помощью графопостроителя. Максимальные размеры рисунков 800 мм x 800 мм.

Описанный выше программный комплекс опробован на 100 образцах различного происхождения: геологических, биологических, экологических пробах и др. Выполнено более 1500 элементоопределений. Перед обработкой спектрометрической информации, выведенной на перфоленту с любого амплитудного анализатора импульсов, не требуется предварительных операций, достаточно располагать калибровочными данными для спектрометрического тракта. Введенный в память ЭВМ сложный спектр /например, из 50 пиков/ с помощью дисплея размечается и готовится к обработке в течение 3-5 мин. На математическую обработку требуется 15-18 мин. Обращение к библиотеке изотопов и выполнение всех расчетов производится за 4-5 мин.

На рис. 2 в качестве примера приведен обработанный с помощью программы гамма-спектр однолетней хвои кедра. Облучение в течение 51 ч проводилось на реакторе Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ ИБР-30 /5/ потоком $4,6 \cdot 10^9$ нейтрон/см²с. Спектр измерялся с помощью Ge(Li) детектора объемом 30 см³ с разрешением 3 кэВ по линии ^{137}Cs / $E_{\gamma} = 0,662$ МэВ/ и амплитудного анализатора импульсов АИ-4096.

В результате математической обработки экспериментатор, помимо основных параметров, располагает дополнительными сведениями: о соотношении пик-фон, о разрешении для обработанных фотопиков, о возможных наложениях и т.д. Поэтому математическая обработка гамма-спектров, используемая в программном комплексе, может быть полезной при отладке выбранного для измерений спектрометрического тракта с целью оптимизации условий измерения гамма-спектров.

Следует еще раз подчеркнуть, что программный комплекс создавался для обработки гамма-спектров, полу-

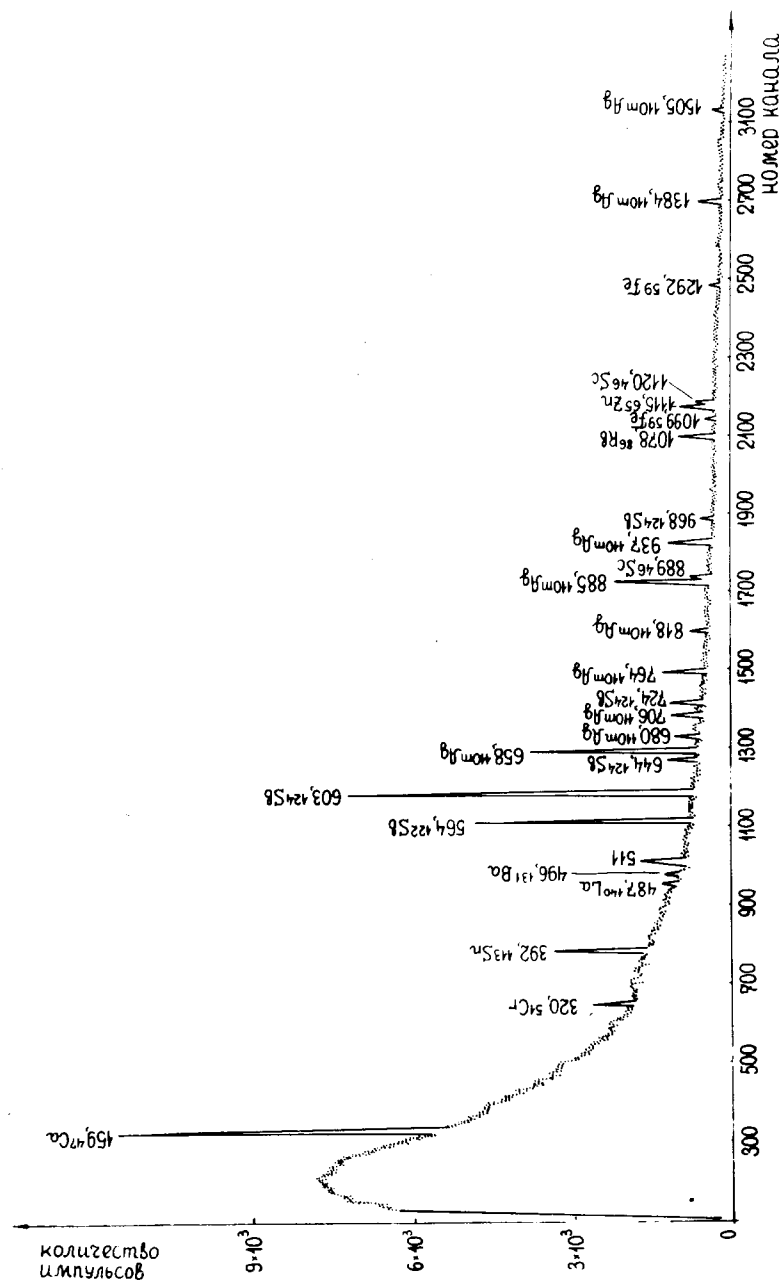


Рис. 2. Гамма-спектр однолетней хвой кебры, измеренный в течение 5 часов после пятнадцатисуточного "охлаждения".

ченных при проведении активационного анализа сложных многокомпонентных объектов с использованием в качестве индикаторов Ge(Li) детекторов с объемом порядка 30-45 см³ с разрешением 2,5 - 4 кэВ в энергетическом диапазоне 0,1 - 3 МэВ. Разработанный комплекс целесообразно применять при опробовании возможностей методов нейтронной активации в различных областях, при разработке новых методик, а также в тех случаях, когда количество исследуемой пробы ограничено и повторные облучения невозможны.

При серийных анализах по отработанной аналитической методике, а также при известном качественном составе проб программный комплекс может быть существенно упрощен и специализирован. Могут быть введены поправки для учета погрешностей работы спектрометрического тракта в тех случаях, когда экспериментатор не располагает оптимальным измерительным оборудованием, возможна оценка вклада в спектр аппаратного фона, а также внешнего фона при измерениях в загрязненном помещении. Все перечисленные возможности заложены в программном комплексе.

К числу разрабатываемых нами решений /в рамках созданного комплекса/ следует отнести оценку вклада комптоновского рассеяния от изотопов с большим сечением активации и от изотопов, содержащихся в пробе в больших количествах. Предполагается обеспечить дополнительный контроль возможных наложений с помощью проверки соотношений интенсивностей фотопиков каждого обнаруженного в спектре изотопа по данным квантовых выходов, заложенным в библиотеку изотопов, и осуществлять с помощью ЭВМ выбор оптимальных временных параметров проведения активационного анализа в зависимости от поставленной перед экспериментатором задачи /6,7/.

Авторы благодарны академику Г.Н.Флерову за постановку задачи и постоянный интерес к работе, а также сотрудникам отдела радиоэлектроники Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ за обеспечение четкой работы спектрометрической аппаратуры и ЭВМ.

Литература

1. Л. М. Беляева, Л. П. Кулькина, И. Ланг, Б. В. Фефилов, Л. П. Челноков. Препринт ОИЯИ, 10-8388, Дубна, 1974.
2. В. Б. Злоказов, Л. П. Кулькина, О. Д. Маслов. АЭ, 39, 4, 286 /1975/.
3. В. Б. Злоказов. Препринт ОИЯИ, 10-7130, Дубна, 1973.
4. В. Б. Злоказов. Препринт ОИЯИ, Е10-9059, Дубна, 1975.
5. Нго Куок Быу, В. Я. Выропаев, Фам Куанг Диен, Е. Л. Журавлева, Фам Зуи Хиен. Радиохимия, 15, 6, 853 /1973/.
6. И. Н. Иванов, В. В. Филиппов, А. С. Штань. Радиационная техника, в. 3, Москва, 1969.
7. Тезисы докладов III Всесоюзного совещания по акти-
вационному анализу. стр. 114, изд-во ФАН УзССР,
Ташкент, 1972.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 ноября 1976 года.