

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



Ц840В
Г-56

8/IX-75

10 - 8928

3394/2-75

В.Гнатович, В.Звольска, И.Ржиковска

СИСТЕМА ПРОГРАММ
ДЛЯ ОБРАБОТКИ ГАММА- И БЕТА-СПЕКТРОВ

1975

10 - 8928

В.Гнатович, В.Звольска, И.Ржиковска

СИСТЕМА ПРОГРАММ
ДЛЯ ОБРАБОТКИ ГАММА- И БЕТА-СПЕКТРОВ

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Введение

В последнее время для измерений спектров гамма-излучения все больше используются спектрометры с полупроводниковыми детекторами. Объем и сложность экспериментальных данных, получаемых при помощи $Ge(Li)$ -детекторов, настолько велики, что стало необходимым использование электронно-вычислительных машин. Целью обработки, основанной на анализе линий полного поглощения, является в первую очередь определение точного положения, площади отдельных линий, соответствующих статистических ошибок и, в конечном итоге, получение информации об энергиях и интенсивностях гамма-переходов.

В настоящей работе описаны программы для комплексной обработки спектров гамма-излучения и для обработки сплошных бета-спектров. Система этих программ дополнена программой для поиска возможных состояний ядра, не противоречащих совокупности данных об энергиях, интенсивностях и мультипольностях гамма-переходов и данных о гамма-гамма-совпадениях. Приведена также программа для оценки смешивания уровней ротационных полос под влиянием взаимодействия Кориолиса по методу Кермана.

Программы написаны на языке АЛГОЛ для ЭВМ *GIER*. Они обозначены номерами, под которыми находятся в библиотеке ЭВМ *GIER* (ИИИ ЧС КАЭ, Ржез). Большинство описываемых программ имеет варианты, для использования их на ЭВМ *Hewlett-Packard 2116B*, которая находится в отделе ядерной спектроскопии ИИФ ЧСАН, Ржез.

Описание программ

1621:

Эта программа выводит спектр на печатающее устройство ЭВМ в виде графиков в полулогарифмическом масштабе. По направлению оси "х" печатаются номера каналов и их содержание (число импульсов).

По оси "у" рисуется спектр. Масштаб по оси "у" меняется автоматически в зависимости от содержания изображаемого канала. Для изображения более коротких участков спектра можно использовать другой вариант программы, печатающий в линейном масштабе заданный участок спектра, из которого автоматически был вычтен линейный фон. Печать одного 4096-канального спектра занимает на ЭВМ GIER семь минут.

I672:

Программа предназначена для полного автоматического и быстрого нахождения позиций и площадей всех линий в сложном гамма-спектре. Поиск линий проводится по известному методу обобщенной второй производной f''/I . Чувствительность процедуры выбирается такой, чтобы можно было найти все линии, которые наблюдаемы визуально на изображенном спектре. Найденные положения линий либо печатаются, либо пробиваются на перфоленту.

Далее программа проводит расчет полуширин изолированных линий с хорошей статистикой и находит наилучшую линейную зависимость полуширины от положения. Полуширины определяются из площади A и амплитуды B (полученных после вычитания линейного фона) по формуле:

$$\text{полуширина} = 0,94 \times A/B. \quad (I)$$

Это имеет место для гауссовой формы линий. Если в спектре нет линий, удобных для расчета полуширины, программа работает со средней постоянной полушириной, задаваемой с входными данными. С учетом полуширины линий далее последовательно определяются группы линий, которые нужно обработать вместе. За отдельные линии принимаются те, которые находятся на расстоянии, большем чем 2,5 полуширины. Группы линий обрабатываются при помощи процедуры, в которой ищется минимум

до расстояния 3,5-4,0 полуширины от крайней линии мультиплета. Из целого таким образом определенного интервала спектра вычитается линейный фон в виде прямой через крайние точки интервала. Суммированием числа импульсов над фоном во всем интервале определяется полная площадь мультиплета. Далее каждый интервал после вычета линейного фона изучается при помощи процедуры, целью которой является нахождение скрытых компонент мультиплета, которые не были обнаружены процедурой поиска. Метод заключается в итерационном решении системы линейных уравнений типа

$$\sum_{k=n}^m K(i-k)g(k) = f(i), \quad i = n, \dots, m, \quad (2)$$

где

$f(i)$ - экспериментальный спектр в точке i ,

$K(i-k)$ - функция, описывающая стандартную форму линий полного поглощения,

n, m - числа начального и конечного каналов интервала.

В программе использована гауссовская форма для функции K , но возможно, конечно, использовать любую другую форму этой функции. При каждом итерационном шаге допускаются только положительные значения решений $g(k)$. Это условие, строго говоря, не оправдано математически, но вытекает из физического смысла $g(k)$ и обеспечивает сходимость процесса. Полученные значения для решений $g(k)$, отличные от нуля в каналах, приблизительно соответствуют положению линий и величине, пропорциональной амплитудам компонент. На рисунке I показан участок спектра, в котором процедурой поиска обнаружена только одна линия. Отрезками в нижней части рисунка показаны решения $g(k)$. Длины отрезков пропорциональны амплитудам компонент.

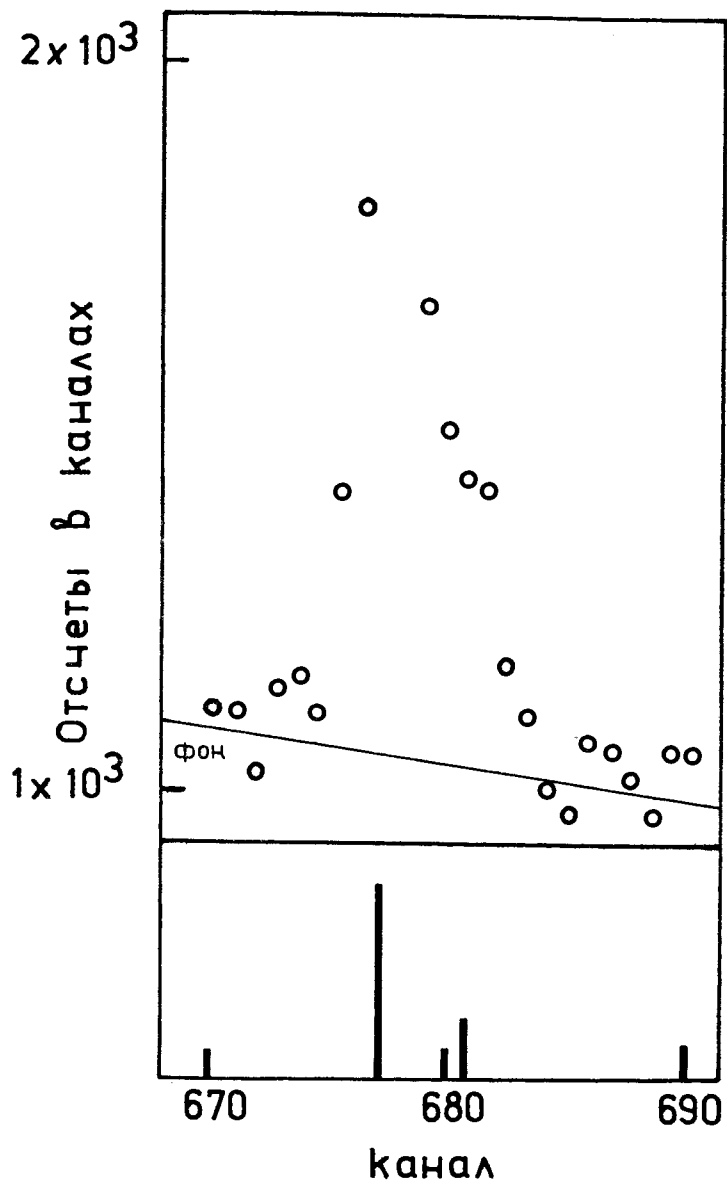


Рис.1. Поиск скрытых компонент мультиплета программой I672.

Результаты поиска положений и площадей линий печатаются на быстропечатающем устройстве, а также могут пробиваться на перфоленту, которую потом можно использовать как входные данные для программы энергетической калибровки (I732). Качество разложения данной группы линий можно также контролировать по графику данного участка спектра, выведенного на печать при помощи быстропечатающего устройства. На таком графике, кроме экспериментальных точек, также отмечен линейный фон и показаны значения $g(k)$.

Результаты программы I672 находятся в хорошем согласии с результатами, полученными при помощи программы I735, предназначенной для точной обработки спектров при помощи метода наименьших квадратов.

Время счета по программе I672 зависит от длины и сложности обрабатываемого спектра. Для 4096 - канального спектра с 50 линиями оно составляет около 15 минут на ЭВМ GIER.

I735:

Программа использует линеаризованный метод наименьших квадратов с затуханием для точного определения положений, полуширин и площадей линий сложных гамма-спектров. Она определяет также статистические ошибки вычисленных величин. В связи с ограничением, обусловленным небольшим объемом оперативной памяти машины, и стремлением к максимальному сокращению счетного времени необходимо было сделать некоторые упрощения, которые, однако, в большинстве случаев не влияют на качество результатов.

Условия, которым должны удовлетворять спектры, подходящие для обработки при помощи данной программы, следующие:

а) форма изолированных линий после вычитания непрерывного фона должна быть приблизительно гауссовой;

б) спектр можно разделить на участки, в которых фон можно аппроксимировать и которые не содержат более 7 линий.

Общая формулировка программы позволяет обходить эти два условия, однако ценой непропорционально большого увеличения счетного времени. В принципе программа пригодна для обработки спектра с любой формой линий, которую возможно задавать даже в виде таблицы.

Программа находит минимум величины

$$R^2 = \sum_{i=p}^k \frac{[f(i) - z(i)]^2}{f(i)}, \quad (3)$$

где

$f(i)$ - число импульсов в канале,

p, k - номера начального и конечного канала обрабатываемого участка,

$z(i)$ - вычисленная величина содержания i -того канала в случае, если форма спектра дается выражением

$$z(i) = \sum_{l=1}^N A(l) \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x(i) - x(l)}{\sigma}\right)^2\right] + \alpha x(i) + \beta, \quad (4)$$

где

$A(l), x(l)$ - амплитуды и положения линий,

N - число линий в интервале,

α, β - параметры линейного фона,

$$\sigma = fwhm / 2.355, \quad (5)$$

$fwhm$ - ширина линии на половине высоты. Величина считается постоянной для данного интервала.

Таблица

Заданные		Рассчитанные	
$E_T(\text{кэВ})$	$I_T^{(a)}$	$E_T^{(b)}(\text{кэВ})$	$I_T^{(a, b)}$
1. 764,65	1,0	764,66 (3)	1,0 (2)
2. 770,65	0,1	770,95 (23)	0,12 (4)
3. 778,65	2,0	778,53 (6)	1,98 (20)
4. 782,65	0,2	782,78 (62)	0,24 (20)
5. 787,65	1,0	787,67 (12)	0,98 (10)
6. 792,65	0,6	792,42 (80)	0,61 (10)

(а) - относительные единицы,

(б) - в скобках приведены ошибки в последнем десятичном знаке.

Минимизация производится обычным итерационным способом^{/2/}, когда для каждого итерационного шага решается система нормальных уравнений. При этом диагональные элементы матрицы А этой системы даны таким образом, что

$$A'_{ii} = A_{ii}(1+d), \quad (6)$$

A_{ii} дается выражением

$$A_{ii} = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial y(k)}{\partial g_i} \right)^2, \quad (7)$$

где g_i - i -тая переменная функции $y(k)$,
 d - параметр затухания, оптимальное значение которого вычисляется для каждого итерационного шага на основании значения, полученного в предыдущем шаге^{/3/}.

Расчеты с введением затухания по сравнению с расчетами без затуханий имеют то преимущество, что значительно снижается количество итераций. Это приводит к значительной экономии машинного времени, хотя число операций в одной итерации больше.

При использовании программы I735 можно выбрать следующие способы расчета:

а) по нескольким изолированным линиям в спектре определяется зависимость полуширины от энергии, и спектр потом обрабатывается с постоянной полушириной, вычисляемой из этой зависимости для каждого интервала спектра;

б) спектр анализируется с полушириной, являющейся переменным параметром или постоянным параметром, полученным каким-нибудь другим образом, чем в случае а).

Входные данные для каждой группы линий, которые будут обрабатываться одновременно, содержат число линий, приближенные положения и информацию о начальных значениях полуширины.

Результатом расчета являются величины $A(k)$, $x(k)$, σ , α , β и их стандартные отклонения, полученные обычным способом из соотношений

$$\Delta_k = \left(R^2 x \frac{D_{kk}}{m} \right)^2, \quad (8)$$

где

D_{kk} - k -тый диагональный элемент матрицы ошибок,

m - число степеней свободы.

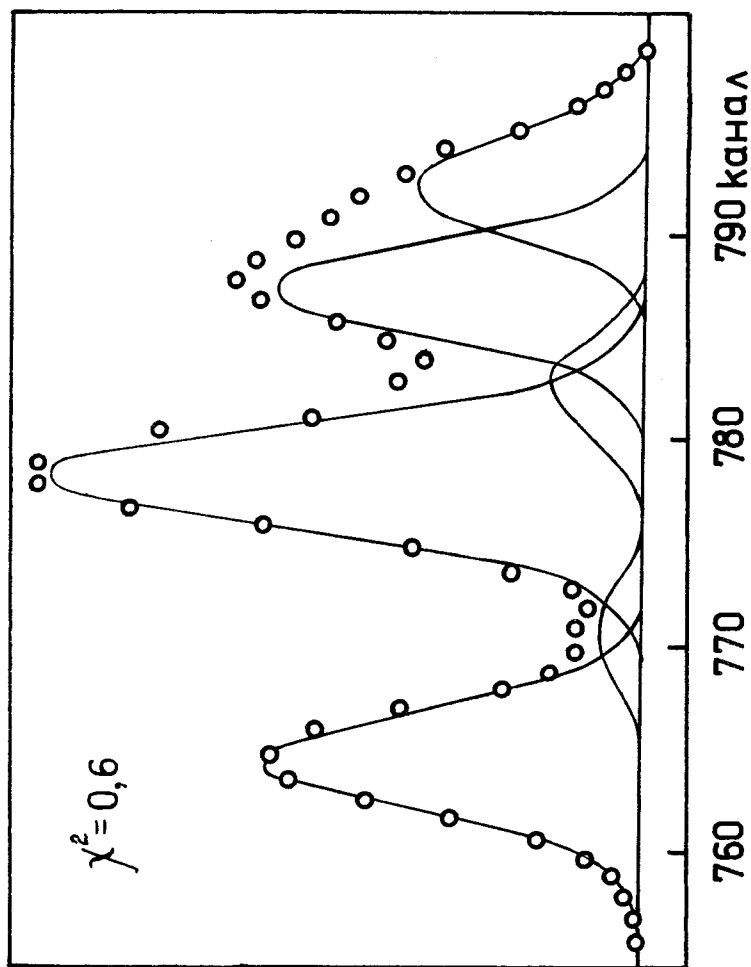
Конечные значения определяемых величин печатаются при помощи быстропечатающего устройства, а также перфорируются в виде, удобном для ввода в программу калибровки (I732). Печать результатов содержит данные об обрабатываемом участке спектра и качестве подгонки в форме таблиц и графиков. На рисунке 2 показан результат подгонки участка искусственно построенного спектра^{/4/}, содержащего 6 линий. В таблице проводится сравнение заданных и вычисленных положений и площади отдельных компонент.

Обработка простой линии на ЭВМ G/ER при помощи программы I735 вместе с печатью результатов происходит приблизительно за 40 секунд. Время счета для более сложных мультиплетов зависит от их сложности, структуры и доходит до 7-8 мин для группы из 6 линий.

I732:

Программа проводит энергетическую калибровку данного спектра, определяет энергию линий и по известным площадям с поправкой на эффективность регистрации детектором определяет интенсивности линий и нормирует их к предварительно заданным значениям. Энергии и интенсивности линий сводятся в таблицу.

Входными данными служат перфоленты программы I735 или I672 (содержащие положения и площади линий), значения энергии заданных калибровочных линий и величины для нормировки интенсивностей.



Отсчеты в каналах

Рис.2. Подгонка сложного участка спектра программой I735.

Энергетическую калибровку можно проводить двумя способами:

а) По методу наименьших квадратов с учетом ошибок зависимой и независимой переменной через калибровочные точки проводится полном n -ной степени. Наиболее подходящая степень полинома выбирается автоматически. В этом варианте проводится только энергетическая калибровка и определяются энергии линий и их ошибки;

б) Положение всех линий в спектре исправляется на нелинейность аппаратуры, и потом через эти исправленные точки проводится прямая по методу наименьших квадратов. Нелинейность аппаратуры определялась для разных режимов измерения при помощи набора калибровочных источников с известными значениями энергии испускаемого излучения. Пример результата такого измерения показан на рис.3. По сравнению с обычными методами калибровки^{/5/} этот метод имеет то главное преимущество, что им можно проводить калибровку при помощи небольшого числа калибровочных точек.

Путем получаемой калибровки также определяются энергии отдельных линий и их ошибки. Далее по известной зависимости эффективности от энергии и по известным значениям площадей линий находятся их интенсивности. Зависимость относительной эффективности от энергии определяется с помощью большого числа стандартных источников для данных условий опыта. Полученные зависимости эффективности от энергии были в системе $\log - \log$ аппроксимированы по методу наименьших квадратов двумя полиномами второй степени, и соответствующие коэффициенты включены в программу.

Время счета по программе I732 (для любого варианта) в основном обусловлено скоростью быстропечатящего устройства и находится в пределах 2-3 минут.

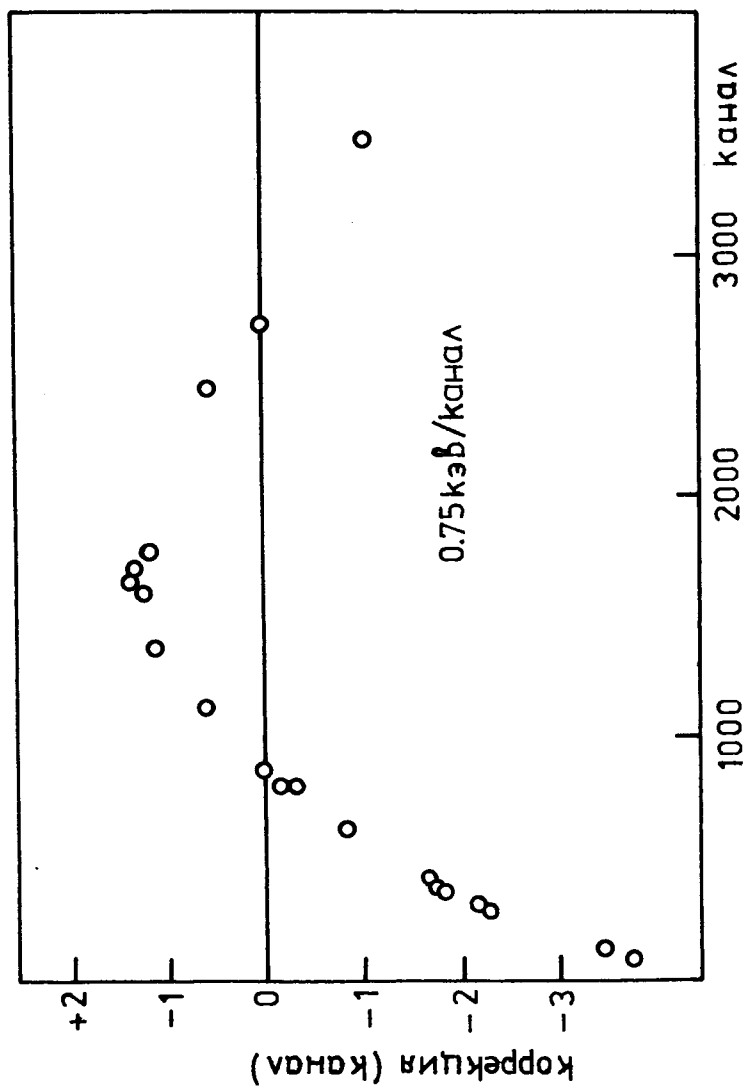


Рис. 2. Зависимость коррекции на нелинейность аппаратуры от номера канала.

I64I/a:

Исходя из ранее известного положения переходов в схеме уровней и из известных энергий переходов, программа определяет наиболее вероятные энергии уровней методом, описанным в работе^{8/}.

Согласно^{8/} ищется методом наименьших квадратов минимум функционала

$$F = \sum_{\substack{k>i \\ T_{ki}>0}} (E_k - E_i - T_{ki})^2 / (\Delta T_{ki})^2, \quad (9)$$

где E_k - неизвестные энергии уровней (уровни заранее нумеруются в порядке возрастающей энергии возбуждения),
 T_{ki} - энергия перехода, идущего из i -того на k -тый уровень,

ΔT_{ki} - ошибка определения энергии T .

Суммирование по индексам проводится по всем уровням. Результирующие ошибки энергий уровней определяются постепенно по формулам, приведенным в работе^{9/}. Для каждого уровня программа подсчитывает баланс интенсивностей, исходя из заданных полных интенсивностей переходов.

Программа написана для ЭВМ GIER. Исходные данные вводятся с перфоленты и содержат для каждого перехода его энергии и соответствующую ошибку, информацию о положении перехода в схеме уровней и полную интенсивность.

Расчет энергий уровней в реальной схеме, содержащей 40 уровней и 90 переходов, требует около 25 минут машинного времени на ЭВМ.

БЕТА-1 и БЕТА-2:

Эти программы составляют систему программ, предназначенных для определения граничных энергий и относительных интенсивностей компонент β^\pm -спектров, измеренных с помощью магнитных бета-спектрометров.

Программа написана для ЭВМ Hewlett-Packard 2116B.

БЕТА-1:

Программа обеспечивает предварительную обработку экспериментальных данных. Входная информация для программы должна содержать для каждой измеренной точки число импульсов, значение $H\rho$, абсолютное время, время экспозиции. Программа проходит в каждой точке коррекцию на распад и на время экспозиции. Определяет также значение кинетической энергии электронов и приводит экспериментальные значения к равным интервалам энергии.

После проведения всех поправок бета-спектр принимает следующий вид:

$$N(E) = \sum_{k=1}^M A_k (E_{ok} - E)^2 F(E, Z) \rho E, \quad (10)$$

где

$N(E)$ - число импульсов в точке с энергией E , исправленное на распад и экспозицию,

M - число компонент спектра,

A_k, E_{ok} - относительные амплитуды и граничные энергии компонент,

$F(E, Z)$ - функция ферми,

ρ - импульс электрона.

Программа дальше определяет значения функции ферми по методу, описанному в работе Джеллепова и др. /10/. После выделения фактором $F(E, Z) \rho E$ спектр приводится к координатам Кюри

$$N'(E) = \frac{N(E)}{F(E, Z) \rho E} = \sum_{k=1}^M A_k (E_{ok} - E)^2. \quad (11)$$

Результаты выдаются на перфоленгу и содержат для каждой точки спектра энергию электронов, значение $F(E, Z)$ и величины N' и $\sqrt{N'}$. По этим данным можно построить график Кюри и произвести предварительный анализ формы бета-спектра.

Перфоленга, полученная в программе БЕТА-1, служит входной информацией для программы БЕТА-2.

БЕТА-2

Программа БЕТА-2 предназначена для определения точных значений относительных интенсивностей и граничных энергий компонент β -спектра.

Для этой цели ищется методом нелинейных наименьших квадратов минимум суммы

$$\Phi = \sum_{i=1}^N \left[N'(E) - \sum_{k=1}^M A_k (E_{ok} - E)^2 \right]^2 / N'(E), \quad (12)$$

где N - число экспериментальных точек,

$$N'(E) = N(E) / F(E, Z) \rho E,$$

где $N(E)$ - экспериментальное число импульсов.

Смысл остальных величин объяснен раньше.

Среднеквадратичные ошибки величин A_k, E_{ok} определяются по общей формуле /2/

$$\Delta = \Phi_0 (D_{k,k})^{1/2},$$

где Φ_0 - значение функционала Φ_0 и $D_{k,k}$ - соответствующий диагональный элемент матрицы ошибок в последнем итерационном шаге.

Программа позволяет проводить расчет для любого участка спектра. Значения амплитуд и граничных энергий и их ошибки печатаются.

164I:

При помощи этой программы определяются возможные уровни ядра на основании энергетического баланса, вычисляется баланс полных интенсивностей, определяется четность и пределы возможных значений спина^{*}). В качестве входных данных задаются:

а) Массив значений энергий уровней, предполагаемых на основании предшествующих соображений, значения ошибок этих энергий, значения четностей и спинов уровней, если они определены;

*) Некоторые принципы программы описаны в /6/.

б) Массив экспериментальных значений энергий переходов, их ошибок, интенсивностей и мультипольностей этих переходов. При последовательном увеличении энергии возможного гипотетического уровня малыми шагами (величина шага выбирается в соответствии с величинами погрешностей заданных уровней и переходов) программа определяет, есть ли среди заданных переходов такой, который можно было бы поместить между гипотетическим уровнем и известным уровнем.

В случае, если число таких комбинаций получается больше, чем заранее заданное число, то печатаются:

- а) значение энергии возможного уровня,
- б) значения энергий заданных уровней, с которых или на которые ведут переходы, заселяющие или разряжающие гипотетический новый уровень,
- в) энергии этих переходов,
- г) четность и пределы возможных значений спина уровня.

2120:

Программа ищет новые уровни ядра и их квантовые характеристики, основываясь:

- 1) на данных об энергиях и квантовых характеристиках уже установленных состояний;
- 2) на экспериментальных данных об энергиях, мультипольностях и интенсивностях переходов, происходящих между уровнями исследуемого ядра, а также
- 3) на экспериментальных данных об энергиях и интенсивностях совпадений гамма-квантов.

На первом этапе программа выбирает из списка переходов такие, которые, в соответствии с их энергией и мультипольностью, можно считать переходами между определенной парой известных уже уровней.

На втором этапе рассчитываются для заданных уровней вероятности совпадений: а) для любого перехода, разряжающего определенный уровень, с переходами, размещенными в данной схеме над этим уровнем, и б) для любого перехода, заселяющего определенный уровень, с переходами, размещенными ниже этого состояния.

На третьем этапе программа получает значения энергий, которые, следуя результатам экспериментов по совпадениям, можно бы считать энергиями кандидатов новых уровней. Для всех переходов, проявляющихся в экспериментах по совпадениям, можно определить нижайшие состояния, ниже которых они не могут быть в схеме уровней опущены. Программа вычисляет для каждого такого перехода сумму его энергии и энергии "нижайшего" уровня, а также суммы энергии перехода и энергий уровней, расположенных по заданной схеме выше "нижайшего", но связанных с ним посредством прямого или каскадного перехода.

На последнем этапе суммы, полученные выше, принимаются как энергии возможных новых состояний. Для каждого такого значения программа ищет среди заданных переходов такие, которые, согласно энергетическому балансу в рамках экспериментальных погрешностей, могли бы осуществляться между новым состоянием и некоторым из уровней схемы. В случае, если такой переход найден, программа выдает сведение об ожидаемых с ним совпадениях и сопоставляет значение интенсивностей совпадений, рассчитанных по схеме, с экспериментальными данными.

В конце каждого этапа печатаются и перфорируются результирующие данные:

- а) энергия возможного нового уровня,
- б) энергия состояния, с которого или на которое совершается переход, заселяющий или разряжающий "новый" уровень,

- в) энергия этого перехода;
- г) соответствующая разность или сумма энергий уровня и перехода, указанных в а) и б);
- д) четность и пределы возможных значений спина нового уровня;
- е) энергии переходов, находящихся в каскадах с переходом, указанным в б), соответствующие интенсивности совпадений, рассчитанные по данной схеме, и их экспериментальные значения, если они имеются.

1899:

Программа проводит оценку смешивания уровней ротационных полос под влиянием взаимодействия Кориолиса и ищет значения параметров в выражении для ротационных уровней, а именно, момента инерции, параметра развязывания и коэффициентов, находящихся у членов более высокого порядка по I . Используется метод наименьших квадратов и формулы^{7/}

(13)

$$E(I) = \frac{1}{2} [E_{k+1}(I) + E_k(I)] \pm \frac{1}{2} \sqrt{[E_{k+1}(I) + E_k(I)]^2 + 4A_k^2(I-k)(I+k-1)}$$

$$E_k = E_0 + AI(I+1) + BI^2(I+1)^2 + CI^3(I+1)^3 + \dots \quad (14)$$

$$+ (-1)^{I+k} \frac{(I+k)!}{(I-k)!} [A_{2k} + B_{2k}I(I+1) + \dots]$$

Время счета обычно не превышает нескольких минут.

При помощи вышеописанной системы программ было обработано уже около трехсот сложных гамма-спектров распада разных изотопов. Система оказалась удобной для быстрой и точной обработки большого количества экспериментальных данных. Полученные этим путем значения энергий и интенсивностей гамма-переходов известных калибровочных стандартов находятся в хорошем согласии с литературными данными.

ЛИТЕРАТУРА

1. J.T.Routti, UCRL - 19 452 (1969) .
2. J.R.Wolberg, Prediction Analysis, D.vanNonstrand Comp., Inc., Princeton, 1967.
3. J.Pitha, R.N.Jones, Internal Report, Division of Pure Chemistry, National Research Council, Ottawa, 1966 (unpublished) .
- ✓ 4. Л.Александров, В.Гаджоков, препринт ОИЯИ, P5-5294, 1970.
5. R.C.Greenwood, R.G.Helmer, R.J.Gehrke, Nucl.Instr.Meth., 77 , 141 (1970) .
6. R.G.Helmer, A.Bäcklin. Nucl.Instr.Meth., 65 , 31 (1968) .
7. O.Nathan, S.G.Nilsson, Alfa-,Beta- and Gamma-Ray Spectroscopy, North Holland Publishing Comp., Amsterdam, 1965, vol.2, p.41 .
8. U.Gruber, R.Koch, B.P.Maier, O.W.B.Schult, Z.Naturforsch., 20a , 929 (1965) .
9. H.Hamermesh, J.E.Monoham, R.K.Smither, Annals of Physics, 13 , 284 (1961) .
- ✓ 10. Б.С.Джелепов, Л.Н.Зырянова. Влияние электрического поля атома на бета-распад. Изд. АН СССР, 1956.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 мая 1975 г.