

8195

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



8195

ЭНЦ. ЧИТ. ЗАЛА

11 - 8195

П.Гипшнер, К.-Г.Каун, Ф.Стари, Н.Ф.Трускова

**ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ  
СЛОЖНЫХ ГАММА-СПЕКТРОВ ГАММА-F**

**1974**

**ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ**

11 - 8195

П.Гиппнер, К.-Г.Каун, Ф.Стари, Н.Ф.Трускова

ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ

СЛОЖНЫХ ГАММА-СПЕКТРОВ **ГАММА-F**

Гиппнер П., Каун К.-Г., Стари Ф., Трускова Н.Ф. 11 - 8195

Программа обработки сложных  $\gamma$ -спектров GAMMA-F

Описана программа, предназначенная для обработки сложных  $\gamma$ -спектров, возникающих в реакциях типа  $(H^1, x_n)$  и измеряемых с помощью  $Ge(Li)$ -детекторов. Программа реализована на ЭВМ БЭСМ-6, язык ФОРТРАН. Для нахождения необходимых параметров используется модифицированный метод наименьших квадратов. Экспериментальные данные аппроксимируются функциями симметричного и асимметричного типов. Осуществляется также калибровка по энергии и определяются интенсивности линий. По желанию возможна выдача результатов в виде таблиц и графиков.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований  
Дубна, 1974

## 1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Программа предназначена для обработки сложных  $\gamma$ -спектров, измеряемых  $Ge(Li)$ -детекторами. Она написана на языке "FORTRAN" и отлажена на ЭВМ БЭСМ-6 Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ. В своей концепции программа исходит из требований, предъявляемых к математической обработке  $\gamma$ -спектров, возбуждаемых в реакциях на пучках ускорителей частиц, в частности, в реакциях типа  $(H^1, x_n)$ . В таких реакциях тяжелые ионы с кинетической энергией, превышающей кулоновский барьер, приводят в основном к реакциям с образованием составного ядра и последующим испарением нескольких нейтронов.

После испарения нейтронов конечное ядро с большой вероятностью остается в возбужденном состоянии. Энергия возбуждения снижается испусканием значительного числа  $\gamma$ -квантов разной энергии. Это приводит к сложным  $\gamma$ -спектрам, содержащим даже в случае применения  $Ge(Li)$ -детекторов с хорошим энергетическим разрешением группы частично и полностью перекрывающихся линий.

Другая особенность возбуждаемых в этих реакциях  $\gamma$ -спектров состоит в наличии интенсивного сплошного фонового распределения, которое обусловлено квазиконтинуумом  $\gamma$ -квантов, излучаемых возбужденными ядрами после испарения нейтронов при переходах на низколежащие состояния, а также наложением комптоновских распределений различных переходов и, наконец, различными

фоновыми компонентами спектров, возникающих в условиях экспериментов на пучках ускорителей заряженных частиц

## 2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРОГРАММЕ

Главные функции, которые должна выполнять программа, можно свести к следующим пунктам:

1. Отделение дискретных  $\gamma$ -линий от сплошного распределения;
2. Определение положений и площадей линий;
3. Калибровка по энергии  $\gamma$ -линий с помощью набора заданных значений энергии;
4. Определение интенсивностей линий с помощью заданной кривой эффективности детектора.

## 3. ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ

Данная программа представляет собой видоизмененный фортранный вариант программы "Гамма-ДИ" /1,2/ с тем существенным отличием, что здесь производится обработка как симметричных, так и асимметричных пиков. Имеется также ряд других отличий.

Следуя работам /1-5/, минимизируем функционал:

$$\chi^2 = \sum_{k=1}^m w_k (Y_k(\vec{p}) - F_k)^2 / (m-n) + \lambda^i (\delta \vec{p}^i)^T I^i (\delta \vec{p}^i) / (m-n),$$

где  $F_k$  - набор экспериментальных величин;  $Y_k(\vec{p})$  - набор аппроксимирующих функций;  $w_k$  - вес, с которым точка  $K$  должна быть учтена в сумме;  $\vec{p}$  - совокупность параметров  $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3, \dots, p_n)$ ;  $n$  - число параметров;  $m$  - число экспериментальных точек;  $m-n$  - число степеней свободы;  $\lambda^i$  - постоянная, зависящая от номера итерации ( $\lambda^i > 0$ );  $I$  - диагональная матрица

$$(I = \text{diag} (I_1, I_2, \dots, I_n); I_1, I_2, \dots > 0)$$

$T$  - знак транспонирования;  $i$  - номер итерации;  $\delta \vec{p}^i = \vec{p}^{i+1} - \vec{p}^i$  - приращение параметров.

Решение находится итеративно по формуле /2/:

$$\vec{p}^{i+1} = \vec{p}^i - [A(\vec{p}^i) + \lambda^i I^i]^{-1} B(\vec{p}^i),$$

где  $A(\vec{p}^i)$  - симметричная матрица с элементами

$$A_{s\ell} = \sum_{k=1}^m w_k \left( \frac{\partial Y_k(\vec{p}^i)}{\partial p_s} \right) \left( \frac{\partial Y_k(\vec{p}^i)}{\partial p_\ell} \right),$$

$B(\vec{p}^i)$  - вектор-столбец с элементами

$$B_\ell = \sum_{k=1}^m w_k (Y_k(\vec{p}^i) - F_k) \left( \frac{\partial Y_k(\vec{p}^i)}{\partial p_\ell} \right).$$

Аппроксимирующая функция  $Y_k(\vec{p})$  выбирается двух типов: симметричного и асимметричного.

Симметричная функция имеет вид:

$$f_j = Y_j(\vec{p}) = \frac{P}{d\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^m S_k \exp \left\{ - \left[ \frac{p}{d} (N_j - N_k) \right]^2 \right\} + \sum_{\ell=1}^s a_\ell (N_j - A)^\ell$$

Асимметричная учитывает асимметрию пиков:

$$f_j = Y_j(\vec{p}) = 4 \sum_{k=1}^m F_k \left\{ \exp \left[ - \frac{(N_j - N_k)}{\sigma(1+a)} \right] + \exp \left[ \frac{N_j - N_k}{\sigma(1-a)} \right] \right\}^{-2} + \sum_{\ell=1}^s a_\ell (N_j - A)^\ell$$

Здесь  $P = 2(\ln 2)^{1/2}$ ;  $d$  - полуширина;  $\sigma = \frac{d}{1.76}$ ;  $A$  - начальный номер канала на участке;  $m$  - количество пиков в участке;  $s$  - степень полинома фона;  $N_k$  - положение максимума в каналах /позиция/;  $F_k$  - значение функции в точке  $N_k$ ;  $S_k$  - площадь пика;  $a_\ell$  - коэффициент фона;  $a$  - коэффициент асимметрии;

$$0 < k \leq m, \quad 0 < \ell \leq s.$$

Введенные здесь обозначения при определении симметричной и асимметричной функций соответствуют обозначениям работы Э. Рупп /6/.

Тип функции можно задавать во входных данных.

Программа обрабатывает сначала несколько отдельных хорошо обусловленных пиков. При этом, если реализуется симметричный тип функции, параметрами являются  $d^{(k)}$ ,  $N_1^{(k)}$ ,  $S_1^{(k)}$ ,  $a_1^{(k)}, \dots, a_s^{(k)}$ .  $k$  - номер пика.

Если функция асимметрична, то добавляется еще коэффициент асимметрии  $a^{(k)}$ . Затем полученные для этих пиков значения полуширины  $d^{(k)}$ , а в случае асимметрии и значения коэффициентов  $a^{(k)}$ , аппроксимируются линейной функцией с помощью метода наименьших квадратов для пиков всего спектра, и при дальнейшей обработке эти величины уже являются фиксированными.

Далее весь обрабатываемый спектр разделяется на участки. При этом учитываются полученные значения полуширин пиков, а также задаваемые во входных данных начальные положения пиков и относительная минимальная ширина участка.

Затем, принимая во внимание тип аппроксимирующей функции, программа последовательно обрабатывает каждый участок. Количество искоемых параметров зависит от числа пиков  $m$  на участке и степени полинома фона  $s$ . Параметрами являются  $N_1, S_1, \dots, N_m, S_m, a_1, \dots, a_s$ . Степень полинома фона  $s$  может принимать значения 1, 2 в зависимости от сложности обрабатываемого участка.

При обработке каждого участка по желанию пользователя печатаются промежуточные результаты, а найденные пики и фон изображаются графически. Для сравнения приводится также график экспериментального спектра.

После обработки всего спектра производится калибровка по энергии. Степень аппроксимирующего полинома можно задавать во входных данных.

Программа может обрабатывать любое количество спектров. Для этого достаточно указать его в числовых данных.

Кроме того, к программе прилагаются также отдельными программами программа калибровки по энергии и программа калибровки по интенсивности.

Кривая эффективности детектора описывается формулой

$$\ln \epsilon = a_0 + a_1 \ln E + a_2 (\ln E)^2 \quad E \leq E_0$$

$$\ln \epsilon = b_0 + b_1 \ln E + b_2 (\ln E)^2 \quad E \geq E_0$$

причем  $\epsilon$  - относительная или абсолютная эффективность детектора,  $E$  - энергия гамма-квантов и  $a_i, b_i (i=0,1,2)$  - параметры кривой эффективности.

В приложении к данной работе приведен порядок задания входных данных, которые вводятся непосредственно перед вводом экспериментальных спектров.

#### 4. ОПЫТ ОБРАБОТКИ ГАММА-СПЕКТРОВ

С помощью данной программы обрабатывалось большое число спектров, полученных при исследовании радиоактивного распада ядер.

Программа решает с большой точностью приведенные выше задачи 1/-4/ для изолированных и двойных линий в спектрах. В случае большего числа линий в одной группе, анализ спектра усложняется из-за недостаточно точного знания формы фонового распределения под линиями. Слишком малые участки фона около группы перекрывающихся линий могут давать для всей группы фон, отличающийся от общей формы фонового распределения по всему спектру. Переход к большим участкам имеет, однако, тот недостаток, что необходимо одновременно анализировать слишком много линий в одной и той же группе. Метод определения фона нами был несколько раз видоизменен, однако без существенных улучшений по отношению к определению формы сплошного фона при наличии нескольких перекрывающихся линий.

Хорошие результаты получены при калибровке по энергиям. Применялся метод "внутренней калибровки", когда в ходе измерения к исследуемому спектру примешивалось гамма-излучение радиоактивных препаратов, энергии гамма-линий которых очень точно известны. Используемые в программе калибровочные полиномы

m-ого порядка позволяют работать практически даже со сравнительно нелинейными спектрометрами. Даваемые программой погрешности в определении энергий переходов вполне соответствуют точности физического эксперимента и кажутся реалистическими. То же самое можно сказать относительно определения интенсивности гамма-линий с помощью заданной извне кривой эффективности детектора, если параметры ее  $a_1$ ,  $b_1$  с достаточной точностью известны.

Очень удобным для работы физиков оказалось представление результатов обработки в графическом виде, обеспечивающем быстрый контроль вычисленных значений положений пиков и полученного программой хода фонового распределения.

Для иллюстрации практических возможностей описанной программы приведены некоторые результаты обработки сложного гамма-спектра, возникающего в реакции  $^{193}\text{Ir}(^{12}\text{C}, 4n)^{201}\text{Bi}$  на пучке циклотрона тяжелых ионов У-300/71. На рис. 1 показана часть этого спектра в области энергий 100-1100 кэВ. Для "автокалибровки" спектра по энергии одновременно измерялись  $\gamma$ -линии от радиоактивного источника  $^{226}\text{Ra}$ , энергии которых с большой точностью измерены. Спектр содержит в целом больше 60 гамма-линий. Включенные в обработку пики отмечены вертикальными штрихами в верхней части рисунка. Некоторые - дополнительно стрелками. Последние служили в качестве одиночных линий для вычисления экспериментальной полуширины линий и для вычисления зависимости ее от энергий гамма-квантов. Ниже измеренного спектра горизонтальными штрихами показаны группы линий, которые программа определяла для одновременной обработки. Большинство этих групп содержит по несколько линий, хотя и встречаются группы с одним только пиком. Некоторые из образованных групп перекрывают друг друга. Нарис. 2 в качестве примеров приведены отдельные части этого спектра и проведенный при анализе спектров уровень сплошного фонового распределения. Положение этих частей спектра в общем спектре можно определить по номерам пиков или по каналам, показанным на рисунке. Как видно из рис. 2,

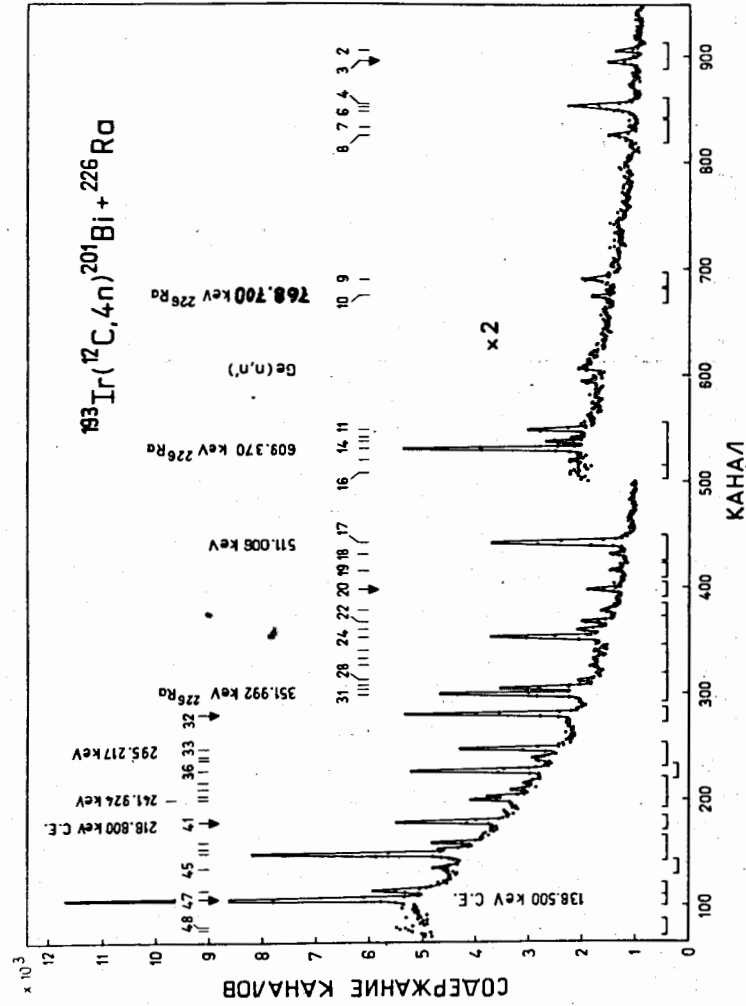


Рис. 1. Гамма-спектр реакции  $^{193}\text{Ir}(^{12}\text{C}, 4n)^{201}\text{Bi}$  в области энергии 100-1100 кэВ. Содержащиеся в этом спектре  $\gamma$ -линии от распада радиоактивного источника  $^{226}\text{Ra}$  служили для автокалибровки спектра по энергии.

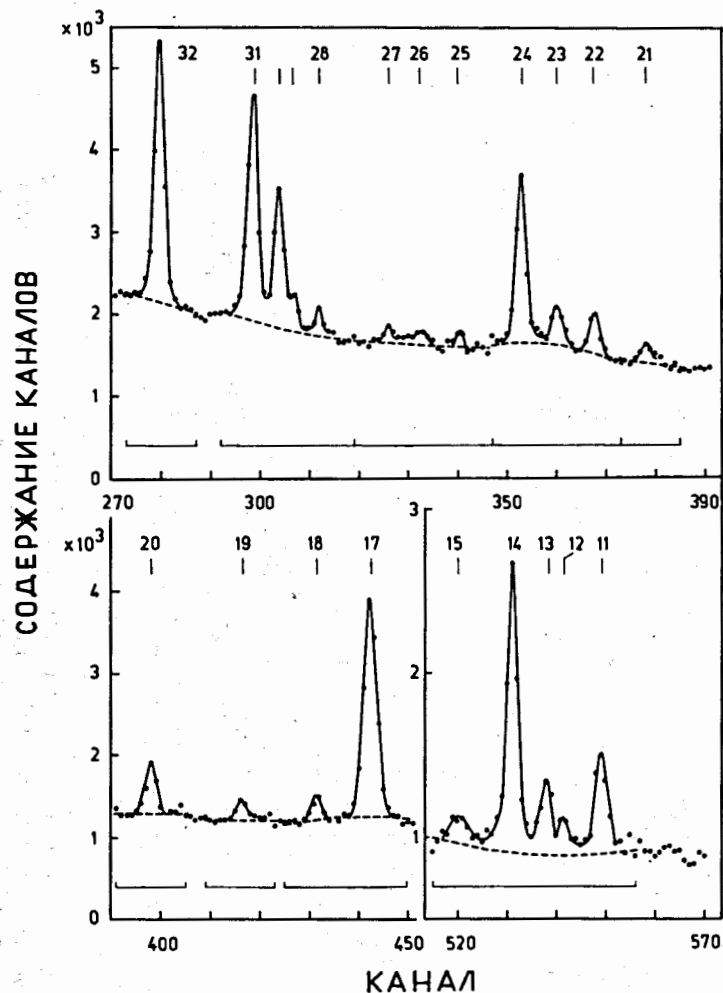


Рис. 2. Части из общего гамма-спектра реакции  $^{193}\text{Ir}(^{12}\text{C}, 4n\gamma)$  и результаты их обработки. Штрихованные линии показывают проведенный программой сплошной фон спектра.

общий ход сплошного фона спектра достаточно хорошо воспроизводится программой. Только в области пиков 11-15 описывающая сплошной фон парабола имеет немного увеличенную кривизну, что может привести к некоторым систематическим ошибкам в определении интенсивностей линий.

В табл. 1 представлено в качестве примера начало распечатки результатов обработки спектра для случая приведенной реакции  $^{193}\text{Ir}(^{12}\text{C}, 4n\gamma)$ . Калибровка по энергиям производилась по хорошо известным энергиям гамма-линий источника  $^{226}\text{Ra}$ , по энергии аннигиляционного пика при 511 кэВ и по пикам кулоновского возбуждения ядра  $^{193}\text{Ir}$  при 218,8 и 138,5 кэВ. В начале распечатки результатов обработки приведены степень и параметры кривой градуировки по энергии, а также точные положения градуировочных пиков и воспроизводство точных значений их энергий.

В последующей части таблицы печатаются рассчитанные значения положений, энергий, площадей и интенсивностей линий и погрешности этих величин.

В заключение авторам приятно выразить свою глубокую благодарность Г. Винтеру за обсуждение наиболее существенных вопросов программы.

#### Литература

1. G. Winter, *Zfk-182, Roseendorf, 1969.*
2. Р. Арльт, Г. Винтер, С. В. Медведь и др. *ОИЯИ, Р6-6227, Дубна, 1972.*
3. K. Levenberg. *Quart. Appl. Math.*, 2, 164 (1944).
4. J. Meiron. *J. Opt. Am.*, 55, 1105 (1965).
5. O. P. Feder. *Appl. Optics*, 2, 1209 (1963).
6. Э. Рупп, *ОИЯИ, 10-6614, Дубна, 1972.*
7. P. Gippner, K.-H. Kaun, W. Neubert, F. Stary, W. Schulze. *JINR, E6-7392, Dubna, 1973.*

Рукопись поступила в издательский отдел  
9 августа 1974 года.

Таблица 1  
Образец распечатки результатов обработки

DEGREE 2

ENERGY CALIBRATION

PARAMETERS

1 1120.420  
2 768.486  
3 609.623

CAL.POINTS

CHANNELS  
990.485 1120.420  
674.039 768.486  
530.992 609.623  
442.301 511.006  
298.595 351.849  
247.358 295.070  
199.289 241.818  
178.533 218.719  
106.203 138.744  
38.799 84.147

REPRODUCTION

KEY  
1120.446  
768.486  
609.623  
511.202  
351.849  
295.070  
241.818  
218.719  
138.744  
84.147

DEVIATION

KEY  
-0.026  
0.214  
-0.253  
-0.196  
0.143  
0.147  
0.106  
0.081  
-0.244  
0.183

WEIGHT

2.054  
0.026  
0.040  
3.446  
0.194  
0.370  
0.369  
0.048  
0.030  
0.009

CHIQU/F 0.0037

T A B L E

POSITION	ERROR	ENERGY	ERROR	AREA	ERROR	INTENSITY	ERROR
990.485	0.437	1120.446	0.520	843	153	12772.916	127799.316
906.625	0.477	1027.104	0.550	809	182	1093243.555	141028.212
895.483	0.339	1014.706	0.402	1126	189	1481578.316	147861.118
853.494	0.519	967.992	0.591	1959	395	2448750.817	257118.009
853.489	1.814	967.986	2.022	560	395	700000.129	87999.999
848.496	0.761	962.432	0.856	650	186	822469.555	103518.000
833.188	0.591	945.406	0.669	417	170	502409.411	79380.100
825.623	0.211	936.991	0.266	1259	178	1498809.110	182854.099

Приложение: Порядок задания входных данных для работы с программой обработки сложных гамма-спектров.

№п/к	Формат	Идентификатор в программе	
1	2	3	4
1.	(I2)	<i>NSP</i>	количество спектров
2.	(50H...)		название спектра
3.	(I2)	<i>ASIM</i>	тип функции. Если <i>ASIM</i> = 0, то реализуется симметричный тип, если <i>ASIM</i> = 1, то асимметричный.
4.	(2I2)	<i>IG1, IT1</i>	График, таблица. Если <i>IG1</i> =1, то печатается график, если <i>IG1</i> =0, то нет. Соответственно, если <i>IT1</i> =0, то печатаются промежуточные результаты в виде таблицы, если <i>IT1</i> =0, то нет.
5.	(9I5)	<i>F, OVT, EFFEC, KA, E, N1, N2, ZP, NE</i>	<i>F</i> - число, характеризующее минимальную ширину участка $2 \leq F \leq 100$ ; <i>OVT</i> - печать промежуточных результатов. <i>EFFEC</i> = 0 или 1 в зависимости от того, производится калибровка по эффективности или нет; <i>KA</i> - число пиков; <i>E</i> - число одиночных линий; <i>N1, N2</i> - начало и конец спектра; <i>ZP</i> - начальная полуширина; <i>NE</i> - число калибровочных линий.
6.	(1(15I5))	<i>PEAK(J), J=1, KA</i>	начальные положения пиков
7.	(1(3I5))	<i>SAAJ(J), J=1, E</i>	положения одиночных пиков
8.	(1(10F8.0))	<i>NN(J), J=N1, N2</i>	спектр
9.	(3F10.3)	<i>AKE(I), ARE(I), DE(I) (I=1, NE)</i>	данные для калибровки по энергии. <i>AKE(I)</i> -канал, <i>ARE(I)</i> - энергия, <i>DE(I)</i> - ошибка энергии
10.	(2I10)	<i>NN1, NN2</i>	максимальная и минимальная степени калибровки по энергии
11.	(3F10.3)	<i>PL(I), I=1, 3</i>	параметры кривой эффективности при $E \leq M$
12.	(I10)	<i>NG</i>	точка максимума энергии в кривой эффективности
13.	(3F10.3)	<i>PH(I), I=1, 3</i>	параметры кривой эффективности при $E \geq NG$