

A-211

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ И  
АВТОМАТИЗАЦИИ

11 - 9752

АВРАМОВ  
Станислав Радев

ВОПРОСЫ  
АВТОМАТИЗАЦИИ ОБРАБОТКИ ГАММА-СПЕКТРОВ,  
ПОЛУЧАЕМЫХ НА СПЕКТРОМЕТРАХ  
С ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ ДЕТЕКТОРАМИ

Специальность 01.01.07 - вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Дубна 1976

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем Объединенного института ядерных исследований.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук профессор Е.П.ЖИДКОВ,  
кандидат физико-математических наук  
старший научный сотрудник В.М.ЦУПКО-СИТНИКОВ.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук  
профессор В.Я.АРСЕНИН,  
кандидат физико-математических наук  
старший научный сотрудник Л.С.НЕФЕДЬЕВА.

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Научно-исследовательский вычислительный центр  
Московского государственного университета  
им. М.В.Ломоносова, г. Москва.

Защита диссертации состоится " " 1976 г.  
в час. на заседании Специализированного совета Д-56/4,  
Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ,  
г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.  
Автореферат разослан " " 1976 г.

Ученый секретарь Специализированного совета  
кандидат физико-математических наук

*Пузынина* Т.П.ПУЗЫНИНА.

В последние годы достигнуты большие успехи в развитии техники измерения ядерного излучения. Эти успехи связаны с общим развитием электроники и вычислительной техники, а также с появлением полупроводниковых детекторов (ППД).

Последние позволяют, благодаря своей относительной простоте и доступности, производить массовые спектрометрические измерения ядерного излучения (в первую очередь  $\gamma$ -излучения) с высоким - до 0,2% - энергетическим разрешением. В настоящее время спектрометрические измерения с помощью ППД являются незаменимой методикой как при исследованиях структуры атомного ядра, так и в прикладных задачах.

Высокое разрешение и большая производительность ППД - спектрометров позволили резко увеличить объем спектрометрической информации. Это обстоятельство значительно повысило интерес к ее автоматизированной обработке, в частности, к обработке  $\gamma$ -спектров, которые составляют основную ее часть.

За последние десять лет вопросам обработки  $\gamma$ -спектров с применением ЭВМ посвящено значительное число работ. В них обсуждаются с разной степенью общности отдельные стороны задачи. Однако используемые методы требуют дальнейшего совершенствования. Необходима разработка новых, специализированных алгоритмов и программ.

Этим вопросам посвящена предлагаемая диссертация.

Работа состоит из введения, четырех глав и заключения.

Во введении кратко рассматривается состояние проблемы в настоящее время и дается обзор диссертации по главам.

Первая глава имеет постановочно-обзорный характер. Она состоит из шести параграфов. В § I вводятся основные понятия о  $\gamma$ -спектре и спектре импульсов. Гамма-спектр, содержащий  $q$  групп квантов со средней энергией  $E_\ell$  и относительной интенсивностью  $J_\ell$   $\ell$ -ой группы, представляется выражением

$$W(E) = \sum_{\ell=1}^q J_\ell \delta(E - E_\ell), \quad (1)$$

где  $\delta(E - E_\ell)$  — дельта-функция Дирака. Для спектра импульсов (СИ), получаемого при измерении  $\gamma$ -спектра (I) ПИД-спектрометром, автором введено представление

$$S(z) = \sum_{\ell=1}^q \sum_{i=1}^4 \frac{J_\ell}{h_i(E_\ell)} S_i(z, E_\ell), \quad (2)$$

где нормирующие множители  $h_i(E)$  характеризуют вероятность регистрации  $\gamma$ -кванта с энергией  $E$  по  $i$ -му эффекту взаимодействия  $\gamma$ -квантов с веществом: фотоэлектрический эффект ( $i=1$ ); рождение пары электрон-позитрон с вылетом одного аннигиляционного  $\gamma$ -кванта с энергией 511 кэВ ( $i=2$ ); рождение пары с вылетом обоих аннигиляционных квантов ( $i=3$ ); рассеяние ( $i=4$ ). Через  $S_i(z, E_\ell)$  обозначена аппаратная функция, соответствующая  $i$ -му эффекту;  $z$  — величина, пропорциональная энергии.

Во втором параграфе формулируется спектрометрическая задача (СЗ). Она состоит в определении характеристик  $\{E_\ell\}$ ,  $\{J_\ell\}$  ( $\ell=1, \dots, q$ )  $\gamma$ -спектра (I) по заданному СИ(2). На основе представления (2) дается обоснование двух используемых в настоящее время методов обработки  $\gamma$ -спектров: после-

довательного вычитания компонент  $\sum_{\ell=1}^q \frac{J_\ell}{h_i(E_\ell)} S_i(z, E_\ell)$

СИ(2) и анализа пиков. Особое внимание уделено более общему методу анализа пиков. При его применении информация, содержащаяся в СИ, разбивается на полезную и фоновую, согласно представлению

$$S(z) = \sum_{\ell=1}^q \sum_{i=1}^3 \frac{J_\ell}{h_i(E_\ell)} S_i(z, E_\ell) + B(z), \quad (3)$$

где

$$B(z) = \sum_{\ell=1}^q \frac{J_\ell}{h_4(E_\ell)} S_4(z, E_\ell)$$

рассматривается как фон.

Формулируются основные задачи, к которым сводится метод анализа пиков (МАП):

1. Построение для аппаратной функции  $S_i(z, E)$  модели  $U_i(z, \sigma_1, \dots, \sigma_n)$ , зависящей от параметров  $\sigma_1, \dots, \sigma_n$ ;
2. Определение значений этих параметров в результате аппроксимации спектра  $S(z)$  функцией

$$U(z) = \sum_{\ell=1}^q \sum_{i=1}^3 C_{\ell i} U_i(z, \sigma_1^\ell, \dots, \sigma_n^\ell) + B(z), \quad (4)$$

где  $B(z)$  — модель фона  $B(z)$ ,  $C_{\ell i}$  — параметры, пропорциональные относительным интенсивностям  $J_\ell$ ;

3. Аппроксимация функций  $h_i(E)$  и  $\alpha_\ell(E)$  ( $\alpha_\ell(E)$  — соответствующим образом выбранный параметр модели  $U_i(z, \sigma_1, \dots, \sigma_n)$ ) по таблицам данных градуировочного измерения (так называемая задача калибровки по эффективности и по энергии);

4. Вычисление с помощью этих зависимостей характеристик  $\gamma$ -спектра  $E_\ell = [\alpha_\ell(E_\ell)]^{-1}$ ,  $J_\ell = C_{\ell i}$ .

В § 3 обсуждаются особенности задачи калибровки. Описан метод<sup>/1/</sup>, предложенный автором для быстрой аппроксимации зависимости  $[\sigma_k(E)]^{-1}$ , позволяющий определять энергию  $\delta$ -квантов с высокой точностью.

В § 4 обсуждаются особенности методов, используемых для решения задачи определения параметров модели СИ (4). Особое внимание уделено методу среднеквадратичной аппроксимации. В этом случае задача сводится к минимизации функционала взвешенной невязки

$$\phi = \sum_{j=m_1}^{m_2} V_j (u(z_j) - s(z_j))^2, \quad (5)$$

где  $z_{m_1}$  и  $z_{m_2}$  - границы рассматриваемого участка СИ,  $V_j$  - весовые множители.

Последние два параграфа посвящены вопросам оптимального выбора модели СИ и структуры программного обеспечения для обработки  $\delta$ -спектров. Сделан вывод, что целесообразно использование разных алгоритмов для каждой из процедур МАП в зависимости от характера и назначения спектрометрической информации<sup>/2/, /3/</sup>.

Во второй главе диссертации рассмотрена теория алгоритмов, применяемых при обработке  $\delta$ -спектров<sup>/4/</sup>. Приведен алгоритм, предложенный в работе<sup>/5/</sup>. Глава состоит из двух параграфов.

Первый параграф посвящен исследованию обобщенного метода Ньютона - итерационного процесса

$$x_0: x_{n+1} = x_n - \beta_n G_{x_n}^{-1} P(x_n) \quad (6)$$

для решения уравнения  $P(x) = 0$ , где  $P$ , вообще

говоря, нелинейный, а  $G_x$  - линейный оператор в банаховом пространстве. Основной результат второго параграфа сводится к следующей теореме (теореме 4 диссертации):

**Теорема.** Пусть оператор  $P$  отображает выпуклое множество  $\Omega$  банахова пространства  $X$  в банахово пространство  $Y$  и на выпуклом, замкнутом, ограниченном множестве  $\Omega_0 \subset \Omega$  имеет непрерывную первую и вторую производную. Пусть существует зависящий от  $x$ , линейный, ограниченный и обратимый оператор  $G_x$ , отображающий  $\Omega_0$  в  $Y$ , который удовлетворяет условиям:

$$\|G_x^{-1}\| \leq \gamma < \infty, (x \in \Omega_0), \quad (7)$$

$$\|P(x)G_x^{-1} - I_Y\| \leq \lambda < 1, (x \in \Omega_0), \quad (8)$$

где  $I_Y$  - тождественный оператор в множестве  $Y$ . Пусть, кроме того,

$$\|P''(x)\| \leq K < \infty, (x \in \Omega_0), \quad (9)$$

$$x_0 \in \Omega_0 \setminus \partial\Omega_0,$$

где  $\partial\Omega_0$  - граница множества  $\Omega_0$ , и

$$\eta_0 = \|P(x_0)\| < \|P(x)\|, (x \in \partial\Omega_0). \quad (10)$$

Тогда, если  $\delta$  - произвольное число в отрезке

$$\left[ \max\left(\frac{1+\lambda}{2}, 1 - \frac{(1-\lambda)^2}{2K\gamma^2\eta_0}\right), 1 \right), \quad (11)$$

то найдутся последовательности чисел

$$\{\beta_n^a\}, \{\beta_n^b\}, (0 < \beta_n^a \leq \beta_n^b \leq 1), (n = 0, 1, \dots)$$

такие, что при любом  $\beta_n \in [\beta_n^a, \beta_n^b]$  итерационный процесс

$$x_{n+1} = x_n - \beta_n G_{x_n}^{-1} P(x_n) \quad (12)$$

сходится к точке  $x^* \in \Omega_0 \setminus \partial \Omega_0$ , которая является решением уравнения  $P(x) = 0$ . Если  $G_{x^*} = P'(x^*)$ , то через конечное число  $N$  шагов  $\beta_n = \beta_n^b = 1$  (при  $n \geq N$ ) и итерационный процесс (12) переходит в локально сходящийся метод Ньютона-Канторовича. Имеют место оценки

$$\|x^* - x_0\| \leq \delta \frac{\eta_0}{1-\delta}, \quad (13)$$

$$\|x^* - x_n\| \leq \delta \frac{\delta^n}{1-\delta} \eta_0, \quad (14)$$

а в случае процесса Ньютона-Канторовича, при  $n \geq N$ ,

$$\|x^* - x_n\| \leq \delta \eta_N \frac{(h/2)^{2^{n-1}}}{1-(h/2)^{2^n}}, \quad (15)$$

где  $\eta_N = \|P(x_N)\|$ ,  $h = K \delta^2 \eta_N$ . (16)

Во втором параграфе продолжено исследование задачи минимизации функционала  $\Phi$ . Рассмотрен итерационный процесс

$$x_{n+1} = x_n - \beta_n D_n [D_n G_{x_n} D_n + d_n I]^{-1} b_n \Phi', \quad (17)$$

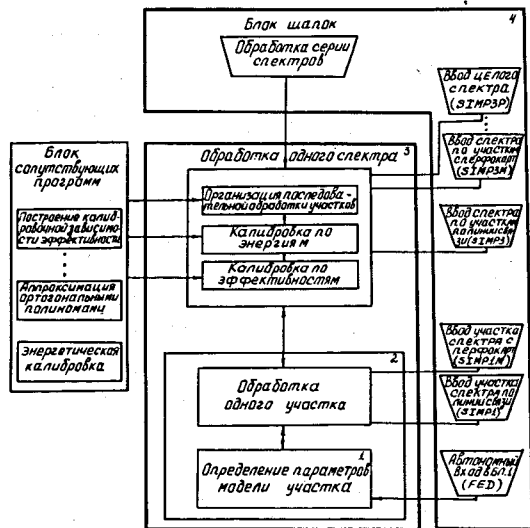
где  $\Phi' = \text{grad } \Phi(x)$ , а  $D_n$  - масштабирующая матрица. Указан способ выбора управляющих параметров  $\beta_n, d_n$  и матрицы  $D_n$ , предложенный в работе<sup>15/</sup> для минимизации функционала (5) в случае, когда он оказывается строго выпуклым.

Третья глава диссертации посвящена описанию пакета взаимосвязанных программ - системы программ *SIMP* <sup>13/</sup>. Назначение системы - дать экспериментатору широко развитый аппарат для прецизионной обработки  $\gamma$ -спектров, позволяющий использовать разные алгоритмы для решения частных задач, составляющих МАП, и легко допускающий включение новых алгоритмов. Процедурные единицы системы объединены в пяти блоках, как это показано на рис. I. К первому блоку отнесены подпрограммы, реализующие алгоритмы минимизации функционала (5) - итерационный процесс (17), и алгоритм минимизации сглаживающего функционала А.Н.Тихонова. Во втором блоке объединены процедуры конкретизации моделей участков. В третьем блоке объединены процедуры, оперирующие всей исходной, промежуточной и конечной информацией<sup>16/,17/</sup>.

Реализация конкретной программы из элементов этих блоков в памяти ЭВМ осуществляется считыванием нужных элементов из личной библиотеки системы *SIMP*. Конкретный набор требуемых элементов указывается в основной программе - шапке. Назначение шапки может сводиться к вызову конкретной программы обработки СИ (или некоторой его части) (см.<sup>18/, 19/</sup>) - простая шапка, или к этой операции и дальнейшей обработке данных о характеристиках  $\gamma$ -спектра - сложная шапка. Все шапки объединяются в четвертом блоке. Их общее количество в настоящее время - 32.

Пятый блок составлен из набора программ, предназначенных для подготовки предварительной информации.

Глава II состоит из семи параграфов. В первом параграфе описаны структура и организация системы, в §§ 2,3,4,5 - отдельные блоки и некоторые из используемых алгоритмов<sup>16/,17/</sup>.



Блок-схема системы программ SIMP

В шестом параграфе проведено сравнение результатов обработки, получаемых при использовании программы системы SIMP и других программ обработки  $\gamma$ -спектров. Показана высокая устойчивость алгоритма, предложенного в работе /5/.

В седьмом параграфе указаны возможности для дальнейшего развития системы SIMP.

В четвертой главе приведены некоторые из результатов исследований распада ядер, удаленных от полосы бета-стабильности, полученные при участии автора с использованием программ системы SIMP (работы /1/, /10 - 13/). Отмечены новые результаты по исследованию образования высокоспиновых ядерных изомеров /14, 15/ при захвате отрицательных пионов ядрами тяжелых элементов.

### З а к л ю ч е н и е

Основные результаты диссертации состоят в следующем:

1. Дана постановка задачи обработки  $\gamma$ -спектров, получаемых на спектрометрах с полупроводниковыми детекторами. В частности:

а) дано обоснование наиболее широко применяемого в настоящее время метода анализа пиков и проведено сравнение используемых методов;

б) проанализирован десятилетний опыт применения метода анализа пиков;

в) на основе результатов этого анализа показано, что для массовой обработки спектров целесообразно использовать пакет программ, позволяющий осуществлять обработку с использованием разных алгоритмов решения частных задач, которые составляют общую задачу обработки спектров при использовании метода анализа пиков.

2. Исследованы условия нелокальной сходимости обобщенного метода Ньютона решения операторных уравнений в банаховом пространстве для операторов, имеющих непрерывную вторую производную.

Разработан и введен в широкую эксплуатацию эффективный алгоритм для решения систем нелинейных алгебраических уравнений, возникающих при обработке спектров.

Показано, что при введении числового параметра можно добиться нелокальной сходимости обобщенного метода Ньютона, оставаясь в рамках основных предположений известной теоремы Л.В.Канторовича о сходимости метода Ньютона.

3. Разработана и введена в эксплуатацию на ЭВМ БЭСМ-6 ОИЯИ широко развитая система программ для обработки спектров с полупроводниковых детекторов, предоставляющая экспериментаторам широкие возможности использовать разнообразные вычислительные алгоритмы при решении общей задачи массовой обработки спектров. Система легко допускает развитие в смысле включения новых алгоритмов, переход к обработке с участием экспериментатора в реальном масштабе времени.

4. С помощью программ системы к началу 1976 г. было обработано около 1500 гамма-спектров. Решены важные задачи по исследованию ядер, удаленных от полосы бета-стабильности, а также некоторые прикладные задачи.

Основное содержание диссертации опубликовано в работах /1-9/. Работы /2,3,5,6/ и работы /8,9/ докладывались на международных совещаниях по ядерной спектроскопии и теории ядра в Дубне - 1975 и 1973 г.г. В работах /10-15/ опубликованы физические результаты, полученные при непосредственном участии автора, с использованием разработанных им программ обработки  $\gamma$  - спектров.

## Л И Т Е Р А Т У Р А

1. С.Р.Аврамов, В.С.Александров и др. Progr. и тезисы XXV сов. по яд. спектроскоп. и структ. ат. ядра. Наука, Л., 1975 (99).
2. С.Р.Аврамов, В.М.Цупко-Ситников. XIV сов. по яд. спектроскоп. и теории ядра. ОИЯИ, Д6-8846, Дубна, 1975 (159).
3. С.Р.Аврамов, В.М.Цупко-Ситников. XIV сов. по яд. спектроскоп. и теории ядра. ОИЯИ, Д6-8846, Дубна, 1975 (161).
4. С.Р.Аврамов. ОИЯИ, РИИ-9222, Дубна, 1975.
5. С.Р.Аврамов. XIV сов. по яд. спектроскоп. и теории ядра. ОИЯИ, Д6-8846, Дубна, 1975 (163).
6. С.Р.Аврамов. XIV сов. по яд. спектроскопии и теории ядра. ОИЯИ, Д6-8846, Дубна, 1975 (165).
7. С.Р.Аврамов, В.С.Бутцев и др. ОИЯИ, IO-9095, Дубна, 1975.
8. С.Р.Аврамов. XIII сов. по яд. спектроскоп. и теории ядра. ОИЯИ, Д6-7094, Дубна, 1973 (176).
9. С.Р.Аврамов. XIII сов. по яд. спектроскоп. и теории ядра. ОИЯИ, Д6-7094, Дубна, 1973 (175).
10. С.Аврамов, Ц.Вылов и др. Программа и тезисы докладов XXV сов. по яд. спектроскоп. и структ. ат. ядра. Наука, Л., 1975 (91).
11. С.Аврамов, С.Бацев и др. Progr. и тезисы докладов XXV сов. по яд. спектроскоп. и структ. ат. ядра. Наука, Л., 1975 (92).
12. С.Аврамов, С.Бацев и др. Progr. и тезисы докладов XXV сов. по яд. спектроскоп. и структ. ат. ядра. Наука, Л., 1975 (96).

13. С.Р.Аврамов, Н.А.Бонч-Осмоловская и др. ОИЯИ, Р6-8781, Дубна, 1975.
14. С.Р.Аврамов, В.С.Бутцев и др. XIV Собрание по яд. спектроскопии и теории ядра, ОИЯИ, Д6-8846, Дубна, 1975 (141).
15. S.R.Avramov, V.S.Butsev, et al. In.: Internat. Conf. on High Energy Physics and Nuclear Structure, 6th, Santa Fe and Los Alamos, 1975, Abstracts of Contributed Papers..., Los Alamos, 1975, p. 190.

Рукопись поступила в издательский отдел  
3 мая 1976 года