

裂变产物 Ge(Li) γ 能谱通用 自动分析程序——GSAP

王德安 王豫生 周玲

(中国科学院原子能研究所)

摘 要

本文提出一个裂变产物 Ge(Li) γ 能谱自动分析程序——GSAP, 并简要地介绍该程序的计算方法。GSAP 使用带适当自变量约束的改进 Levenberg 算法来解峰的最小二乘拟合问题, 最多能分析 8 重峰。GSAP 选取不对称高斯分布加上二次本底作为拟合函数, 一般给出较好的拟合优度。本文介绍了用来证明程序可靠性和精度的各种实验检定。GSAP 在裂变产额测定工作中得到了满意的结果。GSAP 实际上是一个通用程序, 它可以用来分析其它方面实验的 Ge(Li) γ 能谱。

一、序 言

为了分析裂变产物 Ge(Li) γ 能谱¹⁾, 要求使用具有较强的重峰分解能力、较高的精度和自动化程度的程序, GSAP 程序是一个针对这些要求而设计的高精度 γ 能谱自动分析程序。

GSAP 程序使用较新的协方差方法找峰, 能够找出分离度大于 $0.5fwhm$, 相对强度大于 0.1 的峰。

GSAP 程序使用曲线拟合方法来分析谱。解谱时, 最多能分解 8 重峰(谱段的最大宽度为 240 点), 峰面积计算误差(包括重峰分解)一般不超过实验的统计误差。

GSAP 程序是一个全谱扫描。全谱分析程序, 具有较高的自动化程度。在正常情况下, 使用者只需置入一个实验标号, 所有谱分析工作都将由计算机自动完成。在速度为 10 万次/秒的计算机上, 分析一个包含 30—100 个峰的 4096 道谱需要 10—30 分钟。

一年来的实验检定和实际应用表明, GSAP 程序的计算精度、自动化程度和适应范围能够满足我们所承担的裂变产额测定工作的需要。

此外, GSAP 程序还具有一定的通用性, 它可以用来分析其它方面实验产生的 Ge(Li) γ 能谱。

GSAP 程序是用 FORTRAN-IV 语言写的(为了提高计算速度, 一些关键的子程序已改写为汇编语言), 程序的文本和使用说明将在内部资料中介绍。

本文 1978 年 9 月 1 日收到。

1) 因为它的谱形复杂, 峰数极多(在 0—1.5MeV 能区中常包含~100 个 γ 峰)而且多互相重迭。

二、谱分析方法

我们先介绍 GSAP 程序在谱分析的主要步骤中所使用的方法。

1. 找峰方法

在自动处理谱时,选取精密的找峰方法是十分重要的。在本程序中,我们采用一种新的方法——协方差方法来找峰(参阅[4]),其基本思想是模拟人们目测找峰过程,即把自己心目中的峰形和实验谱逐段地比较,如果发现某一段的谱形很“象”峰,即认为该处可能有一个峰。在数学上,这相当于求一个预先假定的峰形(例如高斯分布)和实验谱之间的协方差,因此把它称为协方差方法。

假设第 i 道附近的谱段可以表示为:

$$y_{i+j} = h_i c_j + b_i \quad -T \leq j \leq T, \quad (2.1)$$

其中 c_j 表示峰形, h_i 为峰高, b_i 为本底。用 (2.1) 式来拟合 $i-T$ 到 $i+T$ 间的谱段, 求出 h_i 。 h_i 和它的均方差 Δh_i 之比表示该谱段和峰相象的程度:

$$R_i = \frac{h_i}{\Delta h_i} = \frac{\sum g_j * \sum g_j c_j y_{i+j} - \sum g_j c_j * \sum g_j y_{i+j}}{\{\sum g_j [\sum g_j c_j^2 * \sum g_j - (\sum g_j c_j)^2]\}^{1/2}}, \quad (2.2)$$

其中 g_j 为权重函数,所有求和范围均为 $-T$ 到 T 。在本程序中, g_j , c_j , T 分别取为:

$$\begin{aligned} g_j &= \exp\{-2(j/w)^4\}/y_{i+j}, \quad y_{i+j} \text{ 为谱计数,} \\ c_j &= \exp\{-2.773(j/w)^2\}, \quad -T \leq j \leq T \\ T &= \text{entire}(1.1*w), \quad w \text{ 为峰的估计半宽度 fwhm} \end{aligned} \quad (2.3)$$

在找峰过程中,沿着谱按 (2.2) 式计算 R_i 。当 R_i 在某一道取局部极大并超过指定的阈值时(在本程序中取为 2—3 间的数),即认为找到一个峰。按上述的过程扫描整个谱,即可找出谱中所有的峰。当两个峰很接近时,由于相互干扰峰的相邻侧可能已经不再象峰,而另一侧却可能仍然象峰。因此,为了进一步探测空间上很近的峰和重峰,可以把 (2.2) 式分别应用于半区间 $\langle i-T, i \rangle$ 和 $\langle i, i+T \rangle$, 算出 RL_i 和 RR_i 。当 R_i, RL_i, RR_i 中有一个在某一道取局部极大且超过阈值时,即认为找到一个峰。在本程序中为了节约计算时间和存储量,先计算 R_i 。当 R_i 的局部极大超过阈值时,才在其近傍计算 RL_i 和 RR_i , 以探测重峰。

在本程序调试过程中,我们曾对包含各种强度比和分离度的峰的人工模拟谱进行试验,证明当相邻峰的强度比 > 0.1 , 分离度 > 0.5 fwhm 时,这一方法能找出所有的峰并避免找出假峰。此外,一年来的检验还表明,这一方法在实际应用中一般也是令人满意的。

2. 谱段划分

谱段划分的原则是把相互有干扰的峰放在一段内以便进行曲线拟合。假设谱中有峰位:

$$P_1, P_2, \dots, P_k, P_{k+1}, \dots, P_F \quad (P_i < P_{i+1})$$

如果 $P_2 - P_1 \leq 2*IDS*fwhm$ (其中, IDS 为谱段的分离度, $fwhm$ 为估计半宽度,均可由使用者指定),则认为 P_1, P_2 属于同一谱段,再考虑 P_3 ,直到找到 $P_{k+1} - P_k > 2*IDS*fwhm$,

则认为 P_1, P_2, \dots, P_k 属于同一谱段。于是, 我们得到了一个包含 k 个峰的谱段, 其左、右边界分别取为 $L = P_1 - \text{IDS} * \text{fwhm}$, $U = P_k + \text{IDS} * \text{fwhm}$ 。然后再从 P_{k+1} 出发划分新的谱段。以此类推, 即可把整个谱划分为一系列谱段。

3. 拟合函数的选择

为了进行精确的数据分析必须选取适当的拟合函数, 包括峰形函数和本底函数。正如 [2] 中所指出, 选取简单的峰形函数——高斯分布, 不仅具有参数个数少、迭代收敛快等优点, 而且一般能得到和其它方法同样的拟合优度和计算精度。在编制 GSAP 程序时, 我们就是沿着这一方向来选择峰形函数的(关于峰形函数选法的进一步的讨论参阅 [3]), 但为了反映峰形的不对称性和低能尾部延伸, 我们采用不对称高斯分布作为峰形函数, 二次多项式作为本底, 得到

$$F(i, B) = b_1 + b_2 i + b_3 i^2 + \sum_{j=1}^{N_p} f_j(i, B), \quad L \leq i \leq U \quad (2.4)$$

$$f_j(i, B) = \begin{cases} b_{2j+5} \exp[-(i - b_{2j+4})^2 / 2b_4^2], & i \leq b_{2j+4} \\ b_{2j+5} \exp[-(i - b_{2j+4})^2 / 2b_5^2], & i > b_{2j+4} \end{cases}$$

其中, N_p 为谱段内峰数, 在本程序中限定 $N_p \leq 8$;

$W = U - L + 1$ 为谱段宽度, 在本程序中限定 $W \leq 240$;

b_1, b_2, b_3 分别为本底的零阶项、一阶项和二阶项;

b_4, b_5 分别为峰的左、右两部分方差, 峰的半宽度 $\text{fwhm} = 2.354 * (b_4 + b_5) / 2$, 此处假定整个谱段内所有峰的半宽度都是相同的;

$b_{2j+4}, j = 1, 2, \dots, N_p$, 为谱段内第 j 个峰的峰位;

$b_{2j+5}, j = 1, 2, \dots, N_p$, 为谱段内第 j 个峰的高度。

实际计算表明, 使用拟合函数 (2.4) 一般能得到满意的拟合优度和计算精度 (见第三节), 并能使结果在计算量增加不大的条件下, 比使用 [2] 中的拟合函数有较大的改善。

4. 非线性最小二乘问题的解法

用拟合函数 (2.4) 来拟合指定的谱段可以归结为如下的非线性最小二乘问题:

$$X^2 = \sum_{i=L}^U \frac{1}{y_i} (y_i - F(i, B))^2 = \min, \quad (2.5)$$

为了求解问题 (2.5) 一般使用迭代方法。本程序使用改进的 Levenberg 方法来解问题 (2.5), 而为了提高收敛速度防止发散又需要在迭代前光滑谱段, 并在迭代过程中对迭代向量加以约束。

(i) 谱光滑

GSAP 程序用通常的多项式移动平滑方法(参阅 [5]) 光滑谱, 光滑的点数 N_0 取为不超过半宽度的最大奇整数。如果所得到的 $N_0 < 5$, 则令 $N_0 = 5$; 如果 $N_0 > 11$, 则令 $N_0 = 11$ 。多项式的阶数取为:

$$P = 2, \quad (N_0 < 9)$$

$$P = 4, \quad (N_0 \geq 9)$$

在程序调试过程中, 我们曾对一些谱段作不同次数的光滑处理。表明把谱段作一次

光滑,对提高收敛速度有一定的好处,并且一般不会引起谱形畸变,面积变化小于0.1%。多次光滑耗费的计算机时间较多,所得到的好处却不大。

(ii) 初值的选取

GSAP 程序中选取初值的方法是: 令 $b_1 = y_L, b_2 = (y_R - y_L)/(R - L), b_3 = 0, b_4 = b_5 = 2 * fwhm / 2.354$, 其中 L, R 为谱段的边界道号, y_L, y_R 为相应道的计数; 对应于峰位的参数的初值取为找峰时得到的值; 对应于峰高的参数的初值取为峰位的谱计数减去用上法求出的本底值。实际计算表明, 这样的选法一般是可行的。对一些本底变化剧烈或很复杂的谱段, GSAP 程序允许使用者手工送入初值, 以保证迭代收敛。

(iii) 非线性最小二乘问题的解法

GSAP 程序使用改进的 Levenberg 方法解问题 (2.5), 由给定的初值出发, 从下式计算迭代方向 P^k :

$$\sum_{j=1}^N (a_{ij}^k + \lambda_k a_{ii}^k \delta_{ij}) P_j^k = q_i^k, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2.6)$$

其中,

$$a_{ij}^k = \sum_{l=L}^U \frac{1}{y_l} \left(\frac{\partial F(l, B^k)}{\partial b_i} \right) \left(\frac{\partial F(l, B^k)}{\partial b_j} \right), \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

$$q_i^k = \sum_{l=L}^U \frac{1}{y_l} (F(l, B^k) - y_l) \left(\frac{\partial F(l, B^k)}{\partial b_i} \right), \quad j = 1, 2, \dots, N,$$

$\lambda_k > 0$ 为阻尼因子, $\delta_{ij} = 0, i \neq j; \delta_{ij} = 1, i = j$ 。

方程 (2.6) 的系数矩阵总是非奇异的, 在从 (2.6) 解出迭代方向 P^k 后, 按下式计算步长 α_k :

$$\alpha_k = \begin{cases} 1 & \chi^2(B^{k-1}) > \chi^2(B^k); \\ \alpha_{k-1}/2 & \chi^2(B^{k-1}) \leq \chi^2(B^k). \end{cases} \quad (2.7)$$

在算出 P^k 和 α_k 后, 即可计算下一步的迭代值和 λ_k :

$$b_j^{k+1} = b_j^k - \alpha_k P_j^k \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (2.8)$$

$$\lambda_k = \begin{cases} \lambda_{k-1}/10 & \chi^2(B^k) > \chi^2(B^{k+1}); \\ \lambda_k/10 & \chi^2(B^k) \leq \chi^2(B^{k+1}), \lambda_0 = 1. \end{cases} \quad (2.9)$$

(2.9) 式的意义是, 如果迭代有发散趋势则把阻尼因子乘 10 (当 $\lambda_k > 10000$ 时, 就不再乘 10), 反之则把它除 10。随着迭代的收敛, 阻尼因子将趋向零, 此时 Levenberg 方法将退化为普通的高斯-牛顿法。

当下面的收敛条件之一满足时, 迭代结束:

$$\max_{1 \leq j \leq N} \left| \frac{b_j^{k+1} - b_j^k}{b_j^k} \right| < \varepsilon_1, \quad k > k_{\max}. \quad (2.10)$$

在本程序中, ε_1 和 k_{\max} 分别取为 0.005 和 20。

为了防止发散, 我们引入了如下的约束:

a. 防止迭代矩阵变奇: 当残差很大、阻尼因子过小, 不足以防止迭代矩阵变奇时, 会使方程 (2.6) 的解变得很大, 造成迭代发散。这种情况往往表现为本底参数的绝对值大于

一个很大的正数(例如 10^9), 此时可把拟合参数恢复为迭代前的值, 把阻尼因子乘 10 重新迭代。

b. 防止拟合参数越界: 每个拟合参数都有其实际意义, 其值必须落在一定的范围内。所以, 在每步迭代后如果发现某一参数超出其合理范围, 则把它强制地置为相应的边界值。

计算实践表明, 对一些较复杂的谱段引入上述的约束是十分必要的。

5. 结果处理

GSAP 程序的输出结果为拟合优度, 各峰的位置、能量、可能对应的同位素名、峰面积和半宽度以及它们的误差, 它们都是从问题 (2.5) 的解

$$B = (b_1, b_2, \dots, b_N) \quad (N = 2N_p + 5, N_p \text{ 为峰数})$$

算出的:

$$\text{拟合优度: } FC = \frac{1}{FD} \chi^2(B), \quad (2.11)$$

其中 FD 为自由度等于 $U - L + 1 - N$,

$$\text{峰位: } P_j = b_{2j+4} \quad j = 1, 2, \dots, N_p$$

峰位误差: $\delta P_j = (FC * D_{2j+4, 2j+4})^{1/2}$, $D_{2j+4, 2j+4}$ 为 (2.6) 中迭代矩阵的逆阵的相应对角元。

$$\text{峰面积: } A_j = \sqrt{\frac{\pi}{2}} (b_4 + b_5) b_{2j+5}, \quad j = 1, 2, \dots, N_p$$

$$\text{峰面积相对误差: } \delta A_j = (FC * D_{2j+5, 2j+5})^{1/2} / b_{2j+5}$$

$$\text{半宽度: } fwhm = 2.354(b_4 + b_5)/2$$

在本程序中, 仅当使用者作过能量刻度后, 才计算峰的能量和相应的同位素名, 具体的方法参阅 [3]。

三、实验检定

给准非线性拟合中的误差是十分困难的, 因此有必要通过一系列实验来检定 GSAP 程序的可靠性和精度。实验是在法国 Intertechnique 公司生产的 IN-90 系统上进行, 所用的 Ge(Li) 探测器的分辨率为 2KeV。现将实验检定的结果分述如下(此外, 我们还曾用本程序分析一系列人工模拟谱得到了很好的结果):

1. 定量人工合成谱

我们用含有一定量的 ^{110}Ag , $^{152+154}\text{Eu}$, ^{134}Cs 与 U_3O_8 的混合源和定量的上述单个核素的源, 在相同的几何条件下分别测量并用本程序分析这些 γ 能谱。表 1 列出同一核素在不同的谱中算出的强度的比较。由表 1 可见, 这些结果基本上是合理的, 但由于实验时需作多次单个源测量, 几何不重复性、定量误差、谱仪的不稳定以及本底的变化都给结果带来一定的影响, 并且是难以修正的, 这就妨碍了用这组实验来说明本程序的实际精度。为此, 用下一组实验作进一步考验。

表1 人工合成谱计算结果

能量 (keV)	Ms 谱	UMS 谱	单源谱	$\Delta_{M-u}(\%)$	$\Delta_{M-单}(\%)$
$^{152+154}\text{Eu}$ 121.8	129500	127700	123400	1.6	4.5
$^{152+154}\text{Eu}$ 344.2	59180	56800	56600	3.8	4
^{134}Cs 563.3	6058	5880	5800	4.2	4.5
^{134}Cs 604.8	70650	66850	73900	6	4
^{110}Ag 657.9	6523	6300	7080	3.5	8.5
^{110}Ag 884.5	4510	4640	4115	2.5	7

其中, Ms 谱为各种核素的混合源的谱, UMS 谱为各种核素再加上 U_3O_8 后混合源的谱, Δ_{M-u} , $\Delta_{M-单}$ 分别为 Ms 谱与 UMS 谱或与单源谱相应的峰经重量和死时间校正后的面积差。

2. 多能源的相对分解实验

在本组实验中, 我们只使用含有较复杂能峰的两个源: $^{152+154}\text{Eu}$ 源和含杂质的 $^{108m+110}\text{Ag}$ 源, 先测量 $^{152+154}\text{Eu}$ 的 γ 谱; 然后在其旁加上 $^{108m+110}\text{Ag}$ 源 ($^{152+154}\text{Eu}$ 源固定不动) 测量两个源的混合重迭谱; 最后 $^{108m+110}\text{Ag}$ 源固定, 去掉 $^{152+154}\text{Eu}$ 源, 测量前者的能谱。这样就最大限度地消除了几何误差, 也不存在源的定量误差, 只需要对数据作死时间修正。

(i) 单源谱与双源谱峰面积比较

表 2 列出 $^{152+154}\text{Eu}$ 与 $^{108m+110}\text{Ag}$ 两源分别测得的谱内峰的面积与它们各自在双源测得的谱内相应峰的面积比较结果。由于两种情况下峰的干扰和本底差, 解得的相应峰强度一致与否则可以统计地说明谱分析程序的精度和可靠性。由表 2 可见, 计算误差 (平均值近似 2.6%) 主要反映了峰的统计误差, 其大小与峰面积的统计相当。单、双源峰面积差的平均值约为 1.3%, 小于 (或近似于) 计算误差, 而用作比较的峰有孤立峰也有各种重峰, 这有力地说明了解谱计算结果是可靠的, 由解谱平均附加的误差一般可忽略不计。与 IN-90 的程序的计算结果比较, 其单、双源峰面积平均差近似 5.9%, 其精度明显低于本程序。

表 2 单、双源谱峰面积比较

核素	能量 (keV)	双、单源	内峰面积	峰面积比较		IN-90 面积差值
		双源峰面积	单源峰面积	面积差	计算误差和	
^{110}Ag	4345	12290 \pm .9%	12430 \pm 0.8%	1.1%	1.7%	1%
^{110}Ag	657.9	26000 \pm .8%	26480 \pm 0.7%	1.8%	1.5%	0.7%
^{110}Ag	763.9	5700 \pm 1.5%	5610 \pm 1.6%	1.6%	3.1%	5.5%
$^{152+154}\text{Eu}$	778.6	15880 \pm .9%	15900 \pm 1%	0%	1.9%	2%
^{110}Ag	884.5	15400 \pm .8%	15500 \pm 1.1%	0.8%	1.9%	3.2%
^{46}Sc	889.4	5220 \pm 1.5%	5186 \pm 2%	0.6%	3.5%	7.5%
$^{152+154}\text{Eu}$	1112.0	17960 \pm 1%	17950 \pm 1%	0%	2%	19.5%
^{46}Sc	1120.3	4580 \pm 2.1%	4360 \pm 2%	5%	4.1%	0.3%
	平均值			1.36%	2.6%	5.9%

(ii) 拟合优度分布

表 3 列出用本程序分析 $^{152+154}\text{Eu}$ - $^{108m+110}\text{Ag}$ 谱和另一个谱得到的拟合优度分布, 并与

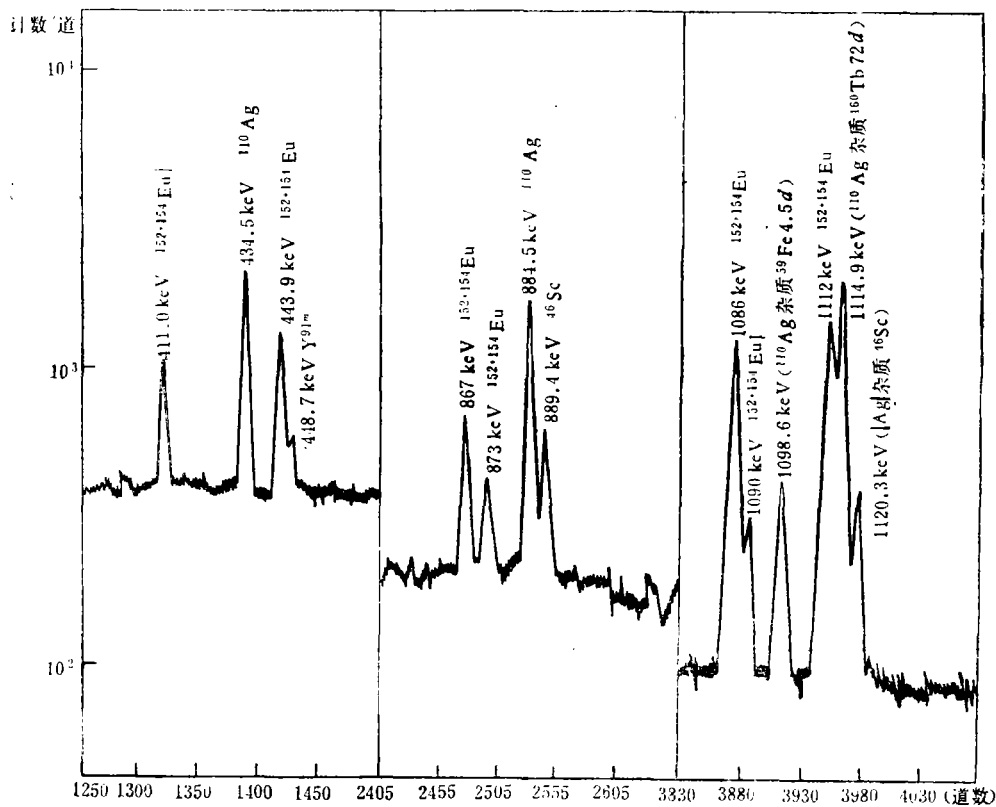
表 3 拟合优度分布表

拟合优度范围	$^{152+154}\text{Eu}-^{108m+110}\text{Ag}$ 谱 计算值	UFL4 ¹⁾ 谱 计算值	[1] 中 Ge(Li) 谱 计算值
0—0.5	12	6	8
0.5—1	24	29	7
1.0—1.5	7	3	10
1.5—3.0	1	5	20
3.0—10	0	8	20
10—100	2	4	14
>100	4	0	2
总峰数	50	55	81
平均拟合优度	~0.8	~0.8	~4—5

1) UFL4 是一个由热裂变靶测得的谱。

[1] 中的结果比较。由该表可见,本程序的拟合优度分布是令人满意的(绝大多数拟合优度值都小于 3)。有少数峰拟合得不太好,这是由于峰的幅度很高 ($> 10^5$) 造成偏离高斯分布(参阅 [2])、小峰落在大峰的康普顿边缘上等原因造成的。

(iii) 典型谱段的平均结果



计算机描绘仪画出的部分原始谱

为了进一步检验峰面积计算特别是重峰分解的精度,将单源 $^{152+154}\text{Eu}$, $^{108m+110}\text{Ag}$ 和 $^{152+154}\text{Eu}-^{108m+110}\text{Ag}$ 作多次重复测量(各测3—5次),从这些谱中选取几个典型的谱段,用本程序进行分析,然后把计算结果加以平均再作比较.表4列出所得的结果,由该表可见本程序的计算结果是令人满意的(谱图见图).

表4 典型谱段平均结果

能量 (keV)	$\Delta S_{\text{双}}$	$\Delta S_{\text{单}}$	双、单面积差	谱段内拟合峰数
411.0	1.9%	1.8%	0.000	单峰
434.5	0.7%	0.6%	0.000	单峰
443.9	1.0%	1.0%	0.055	双重峰
448.7	10%	2.5%	0.150	
867.	1.2%	1.5%	0.015	
873.	6.5%	3.5%	0.058	四重峰
884.5	0.6%	0.7%	0.014	
889.4	1.0%	1.6%	0.041	
1086.0	1.3%	1.2%	0.016	
1090.0	4.0%	3.0%	0.072	六重峰
1098.6	2.5%	2.0%	0.005	
1112.0	1.0%	1.0%	0.030	
1114.9	1.0%	1.0%	0.030	
1120.3	2.8%	2.0%	0.025	

其中 $\Delta S_{\text{双}}$, $\Delta S_{\text{单}}$ 分别为双源谱,单源谱程序计算出的百分面积误差.双、单面积差为该两谱计算同一峰面积差除以峰面积值.

表5 峰面积 t -分布表

能量 (keV)	$^{152+154}\text{Eu}$ 峰	^{110}Ag 峰
	t 值	t 值
411.0	0.32	
434.5		1.26
443.9	2.20	
867	1.25	
873	1.81	
884.5		1.53
889.4		0.417 ¹⁾
1086	0.522	
1090	1.15	
1098.6		0.8 ²⁾
1112.0	1.295	
自由度	4	5
t 临界	2.776	3.182

1)、2) 系 ^{110}Ag 样品中杂质 ^{46}Sc .

(iv) 单、双源峰面积的 t -分布检验

如果谱分析程序是精确的,那末从单源谱和双源谱算出的相应峰的峰面积在统计上应当是相等的,下面我们利用 Student 分布 (t -分布) 来验证上述假设的正确性:对若干次重复测量计算其 t 值,如果 t 值小于某一信度的临界值(本文取 5% 信度),则可认为上

表 6 热样品产额计算结果

核素	能量 (keV)	IN-90 程序			GSAP 程序			
		测量次数		$\Delta/\bar{S}(\%)$	测量次数		$\Delta/\bar{S}(\%)$	平均计算误差(%)
^{103}Ru	497.1	f	3	9.3	f	2	3.0	4.0
		th	3	3.0	th	1	—	4.0
^{99}Mo	739.1	f	4	1.7	f	2	0.05	3.0
		th	4	6.8	th	2	1.20	3.7
^{132}I	772.3	f	4	3.0	f	2	0.5	1.5
		th	3	7.6	th	2	0.0	2.0
^{90}Zr	756.4	f	4	10.0	f	2	1.8	3.0
		th	3	7.0	th	2	0.0	4.0
		平均相对偏差 $\sim 6.05\%$			平均相对偏差 $\sim 1\%$			$\sim 3.2\%$

其中, Δ : 多次测量平均偏差; \bar{S} : 平均峰面积; f, th 分别表示裂变谱中子和热中子照射靶 ^{235}U 获得的谱。

面的假设按该信度是正确的, 反之亦反。表 5 列出利用若干次重复测量的计算结果算出的 t 值。由该表可见, 所有峰的 t 值都满足 $t < t_{\text{临界}}$ 的要求, 因此从单源谱和双源谱算出的相应峰的峰面积在统计上相等这一假定是正确的, 这表明本程序计算峰面积的精度是令人满意的。

3. 热样品产额计算——实验应用

下面, 我们将简单介绍把 GSAP 程序应用于裂变产额计算的部分结果: 把重量为 632.12mg 和 630.85mg 的浓缩 90% $^{235}\text{U}(\text{U}_3\text{O}_8)$ 靶分别在热中子束 ($\sim 10^9\text{n}/\text{cm}^2$) 及裂变谱中子束 ($\sim 10^7\text{n}/\text{cm}^2$) 上照 4 天和 2 天, 冷却 48 小时后跟踪测量, 按每 1000 秒计数推到“0”时。表 6 列出计算结果。由该表可见, 用本程序计算峰面积的重复性很好 (比 IN-90 程序好得多), 由此算得了期望的产额比值。

四、结 束 语

GSAP 程序适合于分析 Ge(Li) 混合 γ 能谱。一年来的实验检定和实际应用表明, 这一程序的自动化程度以及峰面积、能量计算精度均能满足与裂变产额计算有关的实验的要求。

GSAP 程序具有和国外同一领域中先进的程序大体相当的自动化程度。

对恰当选取的计算条件, 本程序的峰面积计算精度为: 对单峰, 除统计误差外通常不必计入解谱计算的附加误差; 对重峰, 在分离度 $D > 1.5\text{fwhm}$, 强度比 $R < 6:1$ 范围内的双重至六重峰, 除计数统计误差外由解谱计算附加的偏差通常在 1% 左右; 对个别分离度小于 1.5 fwhm, 强度比又大于 6:1 的较小的峰, 计算偏差会超过 10%, 但一般不会超过 20%。此外, 本程序计算能量的精度, 只要选好能量刻度点通常为 0.1—0.5 keV。

GSAP 程序还将能应用于其它领域的实验, 但必须恰当地选取计算条件, 必要时还需适当修改拟合函数。

参 考 文 献

- [1] J. Routti, *Nuclear Instruments & Methods*, **72**(1969), p. 125.
[2] T. Zoltowski, *J. of Radioanal. Chem.*, **31**(1976), p. 291.
[3] 王德安, 内部资料.
[4] G. Phillips, *Nuclear Instruments & Methods*, **137**(1976), p. 525.
[5] A. Switryk, *Anal. Chem.*, **36**(1964), p. 1627.

**AN AUTOMATIC GENERAL-PURPOSE PROGRAM FOR
FISSION PRODUCTS Ge (Li) GAMMA-RAY
SPECTRA ANALYSIS-GSAP**

WANG DE-AN WANG YU-SHENG ZHOU LING

(*Institute of Atomic Energy, Academia Sinica*)

ABSTRACT

A complete automatic program for fission products Ge(Li) Gamma-ray spectra analysis-GSAP is presented. The computational methods of the program are briefly described. A modified Levenberg algorithm with suitable argument constraints is used to solve the least-square peak fitting problem. 8 overlapping peaks can be analysed by this program. An unsymmetrical Gaussian superimposed on a parabolic background is selected as the fitting function which usually gives a good fit to most of the peaks in a spectrum. Various experimental tests are described for proving the reliability and accuracy of the program. Satisfactory results for fission yield measurements have been obtained with this program. In fact, this program is a general-purpose program, which can be applied to analyse the Ge (Li) Gamma-ray spectra from other kinds of experiments.