

**ПРИЛОЖЕНИЕ НА ЕКСПОНЕНЦИАЛНО МОДИФИЦИРАНО
ГАУСОВО РАЗПРЕДЕЛЕНИЕ ЗА МОДЕЛИРАНЕ НА
ФОРМАТА НА АЛФА-ПИКОВЕ В АЛФА-СПЕКТРИ**

СРЕБРИН КОЛЕВ

*Физически факултет
Софийски университет „Св. Климент Охридски“*

Сребрин Колев. ПРИЛОЖЕНИЕ НА ЕКСПОНЕНЦИАЛНО МОДИФИЦИРАНО
ГАУСОВО РАЗПРЕДЕЛЕНИЕ ЗА МОДЕЛИРАНЕ НА ФОРМАТА НА АЛФА-ПИКОВЕ В
АЛФА-СПЕКТРИ

Обект на настоящата работа е приложението на експоненциално модифицирания гаусиан като аналитичен модел за формата на асиметрични алфа-спектри (на моноенергетични алфа-частици) с дълги „опашки“ към ниските енергии. Даден е конкретен пример за моделиране на алфа-спектър по метода на най-малките квадрати, както и няколко идеи за оценка на началните параметри на модела и статистическите неопределености на оптималните параметри.

Srebrin Kolev. APPLICATION OF THE EXPONENTIALLY MODIFIED GAUSS
DISTRIBUTION FOR PEAK SHAPE MODELING OF ALPHA-PEAKS IN ALPHA-SPECTRA

The subject of this work is the application of the exponentially modified Gaussian as an analytical model of the shape of asymmetric alpha-spectra (of monoenergetic alpha-particles) with low-energy tailing. A concrete example is given for the nonlinear least squares fitting of an alpha-spectrum, as well as some ideas regarding the initial educated guess of the parameters and the estimates of their statistical uncertainties after the minimization procedure.

Keywords: alpha spectroscopy, exponentially modified Gaussian

PACS number: 23.60.+e

За контакти: Сребрин Колев, Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски”, бул. Джеймс Баучър 5, 1164 София, E-mail: srebrin.kolev@gmail.com

1. УВОД

Известно е, че енергетичният спектър на алфа-частиците, получени вследствие на радиоактивно разпадане, е дискретен. Въпреки това спектърът, който се наблюдава на изхода на една детектираща система, в повечето случаи е съществено по-различен по форма от отклика на детектора. Това прави задачата за деконволюция на алфа-спектри нетривиална и подканва за внимателно организиран подход при обработката на експериментални данни. В настоящата работа е разгледан един от най-успешните аналитични модели за апроксимиране и анализ на алфа-спектри, при който формата на пиковете (получени от алфа-частици) се моделира с експоненциално модифицирано гаусово разпределение. Изложена е същността на подхода и е демонстрирано приложението на метода за анализ на алфа-спектри, получени от сцинтилационен детектор с пластмасов сцинтилатор и източник Pu-239.

2. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА ПОСТАНОВКА

На фиг. 1 е показана експерименталната система, с която са получени спектрите (един от които е анализиран в настоящата работа). Тя се състои от източник Pu-239 (тип 1П9-122, произведен в СССР), пластмасов сцинтилатор (EJ-212, произведен от ELJEN Technology, САЩ); фотоелектронен умножител (R7600U-200, Hamamatsu, Япония); многоканален анализатор с вграден предусилвател (nanoMCA-SP, произведен от labZY, САЩ).

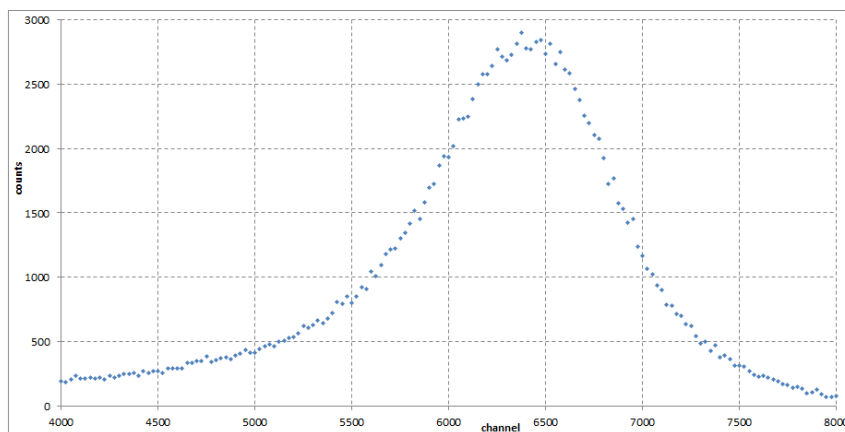


Фиг. 1. Схема на експерименталната система, с която са получени алфа-спектрите

Технологично между плутониевия източник и пластмасовия сцинтилатор има въздушен процеп с дебелина 0,5 mm. За подобряване на оптичния контакт между пластмасовия сцинтилатор и стъклото и между ФЕУ-то и стъклото е нанесен тънък филм от оптична смазка (Saint-Gobain crystals, Франция).

3. ХАРАКТЕРНИ ОСОБЕНОСТИ ПРИ АЛФА-ПИКОВЕ

На фиг. 2 е представен типичен алфа-спектър, получен от горната експериментална система. От съображения за прегледност в спектъра от фиг. 2 е показана само всяка 25-та точка. Избраният интервал на интерес (ROI) е [4000;8000]. Трябва да се подчертае, че лявата опашка в спектъра продължава до самото му начало, а в каналите след 8500 броят натрупани събития е незначителен, поради което наличието на какъвто и да било фон в диапазона на разглежданите енергии ще бъде пренебрегнато.



Фиг. 2. Алфа-спектър на Pu-239

Известно е, че характерната ширина на алфа-линията близо до максимума се дължи най-вече на гаусовия отклик на детектора. Наличието на дълга опашка към ниските енергии от своя страна може да се дължи на разнообразни фактори, водещи до загубата на енергия от алфа-частиците по пътя им към детектора. Това, разбира се, включва процеси като кулоново взаимодействие, стълкновения и генериране на фонони в материалната среда на източника и детектора (както и в средата между тях, с изключение на висок вакуум). Освен към ниските енергии обаче, опашки

често се наблюдават и към високите енергии. Такива опашки се дължат главно на истински съвпадения от регистриране на алфа-частици едновременно с нискоенергетични гама-кванти или конверсионни електрони, излъчени след алфа-разпадането и попаднали в обема на детектора в рамките на разделителното време на системата [1].

4. МОДЕЛИРАНЕ НА ФОРМАТА НА АЛФА-ЛИНИИ

Ясно е, че дори функцията на отклика на детектора да бъде много добре известна, един директен опит за деконволюция на базата на преобразувания на Фурие например би бил, меко казано, неуспешен, колкото и да е „добра“ натрупаната статистика.

През 1984 г. L'Noig предлага апроксимиране на опашката към ниските енергии с експоненциална зависимост [2]. Следователно за формата на спектъра на изхода на детектора би следвало да се очаква конволюция на експонента с гаусовия отклик на системата. Или

$$(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{\mu} e^{\lambda(u-\mu)} e^{-\frac{(x-u)^2}{2\sigma^2}} du, \quad (1)$$

където μ има физическия смисъл на максимална енергия на алфа-частиците.

Пресмятането на интеграла (1) води до следния израз:

$$(f * g)(x) = \tilde{A} e^{\lambda(x-\mu)} \operatorname{erfc}\left(\frac{x-\mu+\lambda\sigma^2}{\sqrt{2}\sigma}\right), \quad (2)$$

където \tilde{A} е нормираща константа. Конволюцията на експонента с гаусиан често се нарича експоненциално модифициран гаусиан (EMG). Оказва се, че идеята за такъв модел е добра, но за да се опишат добре дългите опашки към ниските енергии, често се налага да бъдат добавени повече експоненти при конволюцията с гаусиана. Освен това опашката към високите енергии също може да бъде описана добре от няколко експоненти.

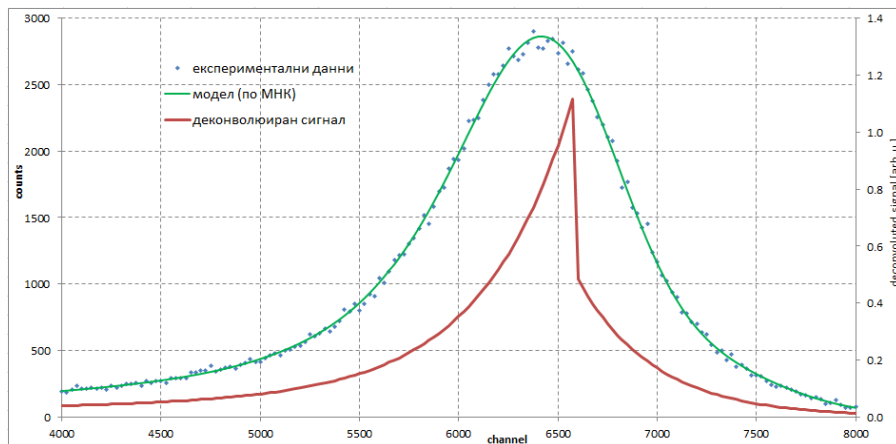
В практиката е удобно да се работи със следния израз [3] като модел на алфа-спектър:

$$F(x) = \sum_{k=1}^n A_k \left(\sum_{i=1}^{10} \eta_i \frac{\lambda_i}{2} e^{\lambda_i(x-\mu_k) + \frac{\lambda_i^2 \sigma^2}{2}} \operatorname{erfc}\left(\frac{x-\mu_k + \lambda_i \sigma^2}{\sqrt{2}\sigma}\right) + \sum_{i=-3}^0 \eta_i \frac{\lambda_i}{2} e^{\lambda_i(\mu_k - x) + \frac{\lambda_i^2 \sigma^2}{2}} \operatorname{erfc}\left(\frac{\mu_k - x + \lambda_i \sigma^2}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right), \quad (3)$$

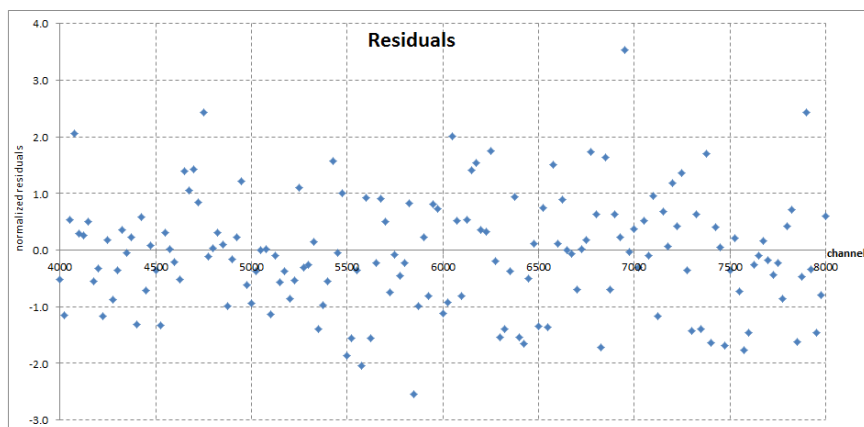
където $\sum_{i=-3}^{10} \eta_i = 1$, n е броят на алфа-линиите в спектъра, а A_k има смисъл на площ на k -тата линия в спектъра. Важно е да се отбележи, че поради крайната дължина на десните опашки е възможно някоя от експонентите в дясната част да даде отрицателен принос към площта на алфа-линията [4]. Това на практика не е проблем, стига да бъде спазена нормировката $\sum_{i=-3}^{10} \eta_i = 1$. Също така броят на левите (десет) и десните (четири) експоненти в опашките не е избран по специален начин, но практиката показва, че този брой е напълно достатъчен за коректното моделиране на алфа-спектри [4], като пълният брой от 14 експоненти сравнително рядко се достига.

5. ПОЛУЧЕНИ РЕЗУЛТАТИ И ОБСЪЖДАНЕ

За конкретния примерен спектър в настоящата работа са достатъчни две леви експоненти и две десни за коректно описване на опашките. На следващите графики са представени съответно направената по метода на най-малките квадрати (МНК) апроксимация (фиг. 3) и нормираните остатъци към модела (фиг. 4).



Фиг. 3. Моделиране на данните



Фиг. 4. Претеглени остатъци към модела

Някои от по-важните параметри на модела, както и техните статистически неопределености (получени от ковариационната матрица), са представени в табл. 1.

Таблица 1. Числени резултати за някои от оптималните параметри

	стойност	стат. неопр.
μ	6580.4	3.3
σ	280.0	2.2
A	4.501E+06	3.8E+04

При процедурата за минимизация могат да бъдат използвани различни методи (някои от които са сравнени в [5]), като за моделирането на спектъра от фиг. 2 е използван алгоритъмът на Levenberg-Marquardt, при който се постига сравнително бърза сходимост при добре подбрани начални оценки за параметрите на модела.

5.1. НАЧАЛНА ОЦЕНКА ЗА ПАРАМЕТРИТЕ НА МОДЕЛА

Тук са дадени няколко идеи как да бъде извършена началната оценка на някои от параметрите. Известно е, че далеч от нулата $\text{erfc}(x)$ се изменя сравнително бавно. Така на основата на (2) може да се направи заключението, че за оценка на $\{\lambda_i\}$ е удобно опашките в спектъра да бъдат

разгледани на достатъчно голямо разстояние от μ и да бъдат апроксимирани с желания брой експоненти. Околността на μ , която трябва да се игнорира, може да бъде (например) $\mu \pm FWHM / 2$. Разумните стойности за параметъра σ от своя страна ще бъдат малко под $\sigma = FWHM / 2,355$. Освен това от (2) сравнително лесно се съобразява, че оптималната стойност на μ се очаква да лежи някъде вдясно от максимума на спектъра, но на разумно разстояние от края на дясната опашка. Отделно от израза (3) се вижда, че A има смисъл на площ, която може да бъде оценена експериментално. Разбира се, тези разсъждения не са единствен или оптимален вариант за начална оценка на параметрите, но практически работят добре, що се отнася до анализа на една алфа-линия. Оценката на параметрите може да бъде затруднена, ако например имаме две или повече алфа-линии, които силно се „припокриват“.

5.2. КРИТЕРИЙ ЗА ИЗБОР НА БРОЯ ЕКСПОНЕНТИ В АНАЛИТИЧНИЯ МОДЕЛ

В табл. 2 са дадени резултати за експериментално пресметнати стойности на случайната величина хи-квадрат (Xsq) според броя леви и десни експоненти в модела (за спектъра от фиг. 2). Първият запис (нула леви и нула десни) съответства на моделиране на данните с гаусово разпределение. „Критичната“ стойност на хи-квадрат за вероятност 0,05 за грешка от първи род в случая е $\chi_{0,05}^2 = 4149$.

$$Xsq = \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - f_i}{\sigma_i} \right)^2$$

Таблица 2. Стойности на Xsq при моделиране с различен брой експоненти

леви	десни	Xsq
0	0	3095174
1	0	162822
2	0	55052
2	1	5086
2	2	4023

Така един критерий за оптимален избор на броя експоненти в аналитичния модел (3) би могъл да бъде минималният брой експоненти, за който тестът за съгласие е издържан за избраното ниво на значимост. Използването на произволно голям брой експоненти (над оптималния) не е оправдано, тъй като в тези случаи се наблюдава несъществено подобрене в модела за сметка на нереалистично големи оценки за неопределеностите на параметрите, свързани с „излишните“ експоненти. Един некоректно зададен модел може несъмнено да доведе и до числена неустойчивост при решаването на задачата. Освен това добавянето на ненужни параметри в модела може да доведе до отместване на оценките за μ и σ , а деконволюираният сигнал може да загуби физичния си смисъл, което се изразява в области, в които сигналът е отрицателен и/или притежава нехарактерна за физичните процеси (свързани с експеримента) форма.

5.3. ОЦЕНКА НА НЕОПРЕДЕЛЕНОСТИТЕ НА ОПТИМАЛНИТЕ ПАРАМЕТРИ

Най-съществена информация при анализа на алфа-спектър несъмнено се получава от параметрите $\{A_k\}$, $\{\mu_k\}$ и σ . В случаите, в които нормираните остатъци (residuals) са разпределени (поне приблизително) гаусово около нулата и избраният критерий за качество на модела е издържан, сравнително добра оценка за статистическата неопределеност на параметрите може да се получи от ковариационната матрица след края на процедурата за минимизация. Във всички останали случаи коректният подход би бил за всеки индивидуален пик в спектъра да се състави бюджет на неопределеностите, след което да се направи допълнителен анализ въз основа на разпространението на тези неопределености до крайните резултати, които получаваме за параметрите [4, 6].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Идеята за апроксимиране на формата на един асиметричен алфа-спектър с експоненциално модифицирано гаусово разпределение в настоящата работа се доказва като отлична, съдейки по получените резултати. Добавянето на повече експоненти (до достигането на оптимален брой) в представения аналитичен модел (3) води до прогресивно подобрене в описанието на експерименталните данни. Същият модел може да бъде използван и за решаването на значително по-сложни задачи, като деконволюция на алфа-спектър, съдържащ няколко алфа-линии, съответстващи на близки енергии, количествен анализ и други [4].

Благодарности. Алфа-спектрите (един от които е анализиран в настоящата работа) са получени с прототип на сцинтилационен спектрометър, разработван в лабораторията по Метрология на йонизиращите лъчения във ФзФ на СУ в рамките на проект ДФНИ Т02/13 “ПОЛИРАД”. Авторът изказва благодарност на доц. д-р Красимир Митев за поставянето на проблема за анализ на алфа-спектри.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Michael, F. L'Annunziata, Handbook of Radioactivity Analysis, Academic Press, 2002.
- [2] A. L'Hoir. Study of the asymmetrical response of silicon surface barrier detectors to MeV light ions. Application to the precise analysis of light ions energy spectra I. Helium ions. *Nucl. Instrum. Methods*, 1984, **A 223**, 336.
- [3] Pommé, St., G. Sibbens. Alpha-particle counting and spectrometry in a primary standardisation laboratory. *Acta Chim. Slov.*, 2008, **55**, 111.
- [4] Pommé, S., B. Caro Marroyo. Improved peak shape fitting in alpha spectra. *Applied Radiation and Isotopes*, 2015, **96**, 148.
- [5] García-Toraño, E. A comparative study of minimization methods in the fitting of alpha-particle spectra. *Nucl. Instrum. Methods*, 1996, **A 369**, 608.
- [6] Pommé, S. Typical uncertainties in alpha-particle spectrometry. *Metrologia*, 2015, **52**, S146.