



АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ЯДЕРНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ  
ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE  
INSTITUTE FOR NUCLEAR RESEARCH

*11.09.93*

Препринт КИЯИ-93-28

*КИУ.І -- 93-28.*

О.А.Пуртов, А.В.Мурзин

ПРОГРАММА ПРЕЦИЗИОННОЙ ОБРАБОТКИ ПРОСТЕЙШИХ  
СПЕКТРОВ ГАММА-ЛУЧЕЙ

Киев 1993

УДК 681.3.061

Программа прецизионной обработки простейших спектров  
гамма-лучей/ Пуртов О.А., Мурзин А.В. - Киев, 1993. - 20 с.  
-(Препр./АН Украины. Ян-т ядерных исслед.; КИНР-93-28).

Описана FORTRAN-программа PIK, которая может быть использована для определения эффективности  $\gamma$ -спектрометров и других задач, связанных с обработкой спектров  $\gamma$ -лучей. Предложен прецизионный метод определения площади пика. Приведен полный текст программы.

Ил. 2. Табл. 1. Прилож. 3. Список лит.: с. 19 (7 назв.).

Code for precise analysis of elementary gamma-ray spectra/  
Purtov O.A., Murzin A.V. - Kiev, 1993. - 20 p. - (Prepr./ Academy  
of Sciences of Ukraine. Institute for Nuclear Research; KINR-93-  
28).

The FORTRAN text PIK code is described, which may be used for the definition of efficiency gamma-spectrometers and some other problems concerned with gamma-ray spectra analysis. The precise method for the definition of peak area is proposed. The full text of the code is presented.

2 figs., 1 table, 3 apps., 7 refs.

Утверждено к печати ученым советом  
Института ядерных исследований АН Украины

## Введение

Современные методы обработки спектров  $\gamma$ -лучей используют модельную форму линии пика полного поглощения либо заданную аналитически с использованием простейших математических функций [1], либо заданную таблично, используя заведомо одиночные  $\gamma$ -пики, трансформируя их в обрабатываемый участок спектра, с учетом зависимости полуширины пика от номера канала спектра [2]. В обоих случаях необходимо с высокой точностью определять площадь модельного пика. В первом случае на точность определения параметров пика, в том числе и площади, существенное влияние оказывают качество аппроксимации, говорящее об адекватности модели пика, корреляция варьируемых параметров, их количество и т. д. При аппроксимации пиков, набранных с хорошей статистической достоверностью (амплитудой выше 10000), возможно большое систематическое расхождение участков экспериментального и модельного спектров. Во втором случае может быть существенная систематическая погрешность определения площади пика, связанная с субъективностью выбора границ обрабатываемого участка спектра, с вводом априорной зависимости фона от номера канала спектра. Зачастую в этом методе не учитывается подставка под пиком, связанная с неполным собиранием носителей зарядов в полупроводниковом детекторе.

В настоящей работе описана FORTRAN-программа PIK, предназначенная для обработки простейших  $\gamma$ -спектров, в которой сочетаются положительные качества обоих вариантов модельной обработки  $\gamma$ -пика, особенно при получении его площади. Программа использовалась для прецизионного определения эффективности  $\gamma$ -спектрометров и обработки спектров  $\gamma$ -лучей, получаемых в экспериментах по определению сечения активации золота.

## Модель формы линии пика полного поглощения

Для моделирования аппаратурной формы линии пика полного поглощения использованы простейшие математические функции, скорость вычисления которых на ЭВМ достаточно высока. Обрабатываемый участок спектра, содержащий пик в канале  $x_0$ , разбивается на три отрезка. Считая, что  $y(x)$  - число отсчетов в канале  $x$ , модельная форма линии рассчитывается как

$$\left. \begin{aligned} y(x) &= F + y_1 + y_2 + y_4, & \text{если } x \leq x_0 - t\sigma - a\omega; \\ y(x) &= F + y_1 + y_2 + y_3, & \text{если } x_0 - t\sigma - a\omega < x \leq x_0 + 2\sigma; \\ y(x) &= F + y_1, & \text{если } x > x_0 + 2\sigma, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где функции  $y_1, y_2, y_3, y_4$  и  $F$  приняты следующими:

$y_1 = N_0 \cdot \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right]$  - большой гаусс, описывает пик полного поглощения в ПЩ;

$y_2 = \frac{N_0 \cdot h_2}{\pi} \cdot \left[1 + \frac{b}{\sigma} \cdot (x-x_n)\right] \cdot \arctg\left[(x-x_0+k\sigma) \cdot \frac{m}{\sigma}\right]$  - подставка под пиком, связанная, в основном, с неполным собиранием носителей зарядов в ПЩ,  $h_2$  - амплитуда полки (в единицах  $N_0$ ),  $b$  - ее наклон;

$y_3 = N_0 \cdot h_1 \cdot \exp\left[-\frac{(x-x_0+t\sigma)^2}{2\sigma^2}\right]$  - малый гаусс, расположенный слева от большого, описывает затяжку левого склона пика полного поглощения;  $h_1$  - амплитуда малого гаусса (в единицах  $N_0$ );

$y_4 = N_0 \cdot h_1 \cdot \exp\left[\frac{a\omega}{\sigma^2} \cdot (x-x_0 + t\sigma + \frac{a\omega}{2})\right]$  - экспонента, пришиваемая к левому склону малого гаусса в точке  $x=x_0 - t\sigma - a\omega$ . Параметр  $a$  аналогичен описанному в работе [5];

$F = A + B \cdot (x-x_n)$  - фон под пиком.  $A$  и  $B$  - параметры фона,  $x_n$  - начальный канал обработки участка спектра.

Константы  $m, k, t$  и  $b$  выбирались равными  $m=0, k=3.5, t=2, b=0$ . Считалось, что эти параметры не зависят от детектора.

Величина  $\omega=2.3548 \cdot \sigma$  - полная ширина пика на полувысоте (ПШПВ).

К преимуществам модели пика (1) следует отнести то, что для качественного описания аппаратурной формы линии пика необходимо найти, кроме обычных для пикобразной формы параметров  $x_0, N_0, \sigma$ , лишь три дополнительных параметра  $h_1, h_2, a$ . Численные значения

параметров  $h_1$ ,  $h_2$ ,  $\alpha$  и их энергетическая зависимость извлекались путем предварительного исследования формы линии  $\gamma$ -пиков из координат ОСТИ для конкретного ПЩ и лежали, как правило, в пределах:  $h_1 - [0.01 \dots 0.2]$ ;  $h_2 - [0.003 \dots 0.02]$ ;  $\alpha - [0.1 \dots 0.7]$ .

Для аппроксимации пика по модели (1) использовался нелинейный метод наименьших квадратов (МНК). На рис. 1 представлен участок  $\gamma$ -спектра от источника ОСТИ  $^{137}\text{Cs}$  и составляющие модельной формы линии, иллюстрирующие (1), после МНК-аппроксимации.

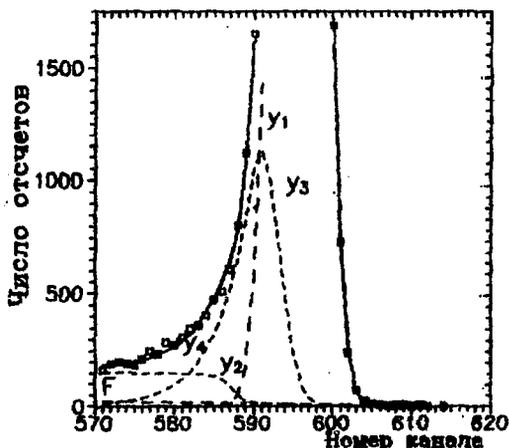


Рис. 1.

#### Метод нахождения площади пика

При нахождении площади пика использовались параметры, найденные в результате аппроксимации пика по модели (1). Для этого из спектра вычиталась фоновая компонента  $F=A+B \cdot (x-x_0)$ , а площадь вычислялась суммированием в пределах  $x_0 - 30 \leq x \leq x_R$ , где  $x_R$  — правая граница обрабатываемого участка спектра, обычно  $x_R = x_0 + 50$ . При этом левая граница  $x_L = x_0 - 30$  для удобства суммирования корректировалась таким образом, чтобы  $x_L$  попадала точно посередине между соответствующими каналами. Далее к полученной площади добавляются площади хвостов малого и большого гауссов.

лежащие слева от  $x_L$ , и вычитается площадь ступени от арктангенса, лежащая справа от  $x_L$ :

$$S = \int_{x_L}^{x_n} (y_1 - A - B(x_1 - x_n)) - \int_{x_0}^{x_0+2\sigma} y_2(x) dx + \int_{x_L}^{x_n} (y_1(x) + y_2(x)) dx, \quad (2)$$

где  $x_n = x_0 - 8\sigma$ .

Рис. 2 иллюстрирует описанный метод нахождения площади пика. В погрешность определения площади наибольший вклад вносят статистические погрешности экспериментальных данных и погрешности определения параметров фона ( $\Delta A$  и  $\Delta B$ ) из аппроксимации МНК. Вклады погрешностей определения остальных параметров ( $H_0$ ,  $x_0$ ,  $h_1$ ,  $h_2$  и  $\sigma$ ) в полную величину погрешности площади, пропорциональные величинам соответствующих интегралов в (2), также учитывались, но из-за малости этих интегралов были незначительны.

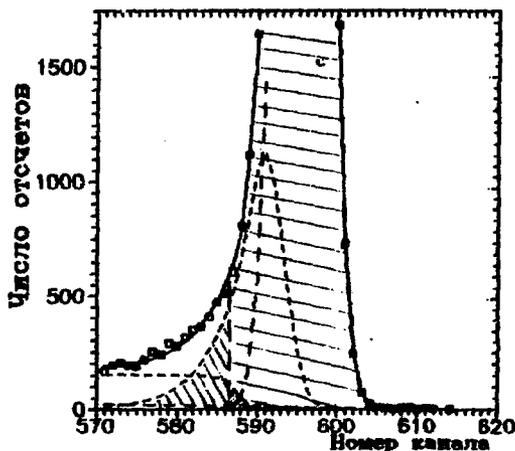


Рис. 2.

Для тестирования описанного метода нахождения площади пика были измерены следующие варианты спектров (по три спектра каждого варианта без перестановки образцов):

- спектр  $^{137}\text{Cs}$  с ПМФВ пика 9.0 каналов на малом фоне;
- спектр  $^{137}\text{Cs}$  с ПМФВ пика 4.5 канала (усиление уменьшено в два раза) на малом фоне;
- спектр  $^{137}\text{Cs}$  с ПМФВ пика 9.0 каналов на фоне источника  $^{60}\text{Co}$ .

Результаты тестирования приведены в таблице. В ней представлены положения, ПШПВ и площади пиков, определенные методом наименьших квадратов и описанным методом. Из таблицы видно, что по площади результаты согласуются в пределах приводимой погрешности. Погрешности площади пика на фоне и определенные МНК, как и следовало ожидать, несколько больше погрешности остальных измерений.

$x_0 \pm \Delta x$	$FWHM \pm \Delta FWHM$	$S \pm \Delta S$	$S_{MНК} \pm \Delta S$
1789.85 ± 0.04	9.03 ± 0.03	91840 ± 304	91697 ± 522
1789.80 ± 0.04	9.12 ± 0.04	91948 ± 304	91749 ± 640
1789.91 ± 0.04	9.07 ± 0.05	91621 ± 305	91535 ± 611
891.20 ± 0.03	4.52 ± 0.05	91574 ± 320	91501 ± 632
891.54 ± 0.03	4.50 ± 0.05	91757 ± 326	91715 ± 528
891.35 ± 0.03	4.57 ± 0.05	91797 ± 321	91782 ± 614
1789.74 ± 0.05	9.05 ± 0.04	91357 ± 353	91385 ± 590
1790.09 ± 0.05	9.14 ± 0.04	91509 ± 352	91452 ± 535
1789.92 ± 0.05	9.11 ± 0.04	91297 ± 353	91316 ± 573

Примечание. При расчете площади пиков сделаны коррекции на период полураспада источника и на "мертвое время" аппаратуры.

#### Краткое описание программы PIK

Полный текст программы PIK приведен в приложении 1. В комплект программы PIK входят следующие файлы и подпрограммы:

1. PIK.FOR - основная программа, осуществляющая связь подпрограмм, описанных ниже. Программа считывает начальные данные из файла P.PIK и записывает результаты обработки  $\gamma$ -спектра в файл P.LST в виде, удобном для анализа и архивирования.

2. CALL WDR(ITIP) - подпрограмма, осуществляющая вызов файла, содержащего спектр  $\gamma$ -лучей (в дальнейшем - спектр).

COMMON/DER/NS,SP(4096)

COMMON/FYL/IQ,IFILE(17)

IFILE - имя файла, содержащего спектр

ITIP- тип спектра: 1 - целый, 2 - вещественный

NS - число каналов в спектре IFILE (не более 4096)

SP - массив данных спектра (до 4096 каналов)

3. CALL POISK(IP) - подпрограмма поиска пикообразной компоненты в спектре. Для поиска пиков используется метод дифференцирования спектра с использованием функций типа числового фильтра [4]. Вычисляются оглаженные первая и вторая производные спектра и отмечаются места перехода первой производной с "+" на "-" как возможные положения пиков. При этом вторая производная должна быть отрицательна не менее чем в трех точках и превышать по модулю свою погрешность более чем в два раза. Далее пик проверяется по площади на статистическую значимость. Подпрограмма POISK-модернизированный вариант подпрограммы из [6,7].

COMMON/PIK/DT,RRR,POL(60),S20(60),S30(60)

COMMON/DER/NS,SP(4096)

POL(IP) - положение пика

S20(IP) - площадь пика

S30(IP) - погрешность площади пика

IP - число найденных пиков

4. CALL UMNK(MK,M,M1,NN,N,B,D,DDB,XI,A) - подпрограмма, реализующая нелинейный метод наименьших квадратов [3] при аппроксимации участка спектра.

COMMON/Y/X(150),YT(150),YE(150),DYE(150)

M - число варьируемых параметров, M1=M+1

B(M) - массив начальных значений параметров при входе в подпрограмму и массив результирующих значений параметров при выходе из подпрограммы

A(M,M1) - информационная матрица на входе и корреляционная матрица на выходе подпрограммы

DD(M) - матрица погрешностей массива B на выходе

X(N) - массив номеров каналов

YE(N) - массив экспериментальных данных

YT(N) - массив теоретических значений данных

DYE(N) - массив квадратов погрешностей экспериментальных данных YE(N)

N - число экспериментальных точек

5. CALL ROBS(N,M1,X,A) - подпрограмма реализующая решение системы линейных уравнений методом Гаусса [3].

A(N,M1) - коэффициенты системы линейных уравнений

X(N) - найденно значение решений

6. CALL F(M,B,X,Y,DY) - подпрограмма, реализующая описание участка спектра по модельной форме линии (1) для нелинейного метода наименьших квадратов. Содержит производные выражений (1) по искомым параметрам пика  $H_0$ ,  $\sigma$ ,  $x_0$  и параметрам фона  $A$  и  $B$ . При начальной настройке программы на новый спектрометр возможно нахождение параметров  $h_1$ ,  $h_2$  и  $\alpha$ . Соответствующие производные выражений (1) также реализованы в этой подпрограмме.

COMMON/XM/H1,H2,AL,BB,GK,GT,GM,NH,NOOM

Обозначения параметров:  $B(1)=\sigma$ ;  $B(2)=x_0$ ;  $B(3)=H_0$ ;  $B(4)=A$ ;  
 $B(5)=B$ ;  $B(6)=H1=h_1$ ;  $B(7)=H2=h_2$ ;  $B(8)=AL=\alpha$ ,  $GK=k$ ,  $GT=t$ ,  $GM=m$ .

При настройке программы имеется возможность найти начальные значения параметров  $h_1$ ,  $h_2$  и  $\alpha$ .

7. CALL SGS(B,D,NT,SSS,DSSS) - подпрограмма гистограммного нахождения площади пика с учетом параметризации (1). Подробное описание этого метода приводилось выше.

$B(M)$  - параметры пика, полученные в результате аппроксимации

$D(M)$  - погрешности параметров  $B(M)$

$NT$  - число каналов аппроксимируемого спектра

$SSS$  - площадь пика

$DSSS$  - погрешность площади пика  $SSS$

8. P.PIK - файл данных, содержащий начальную информацию о параметрах модельного пика  $h_1$ ,  $h_2$ ,  $\alpha$ ,  $b$ ,  $k$ ,  $t$ ,  $m$ , размере спектра и параметрах энергетической калибровки. Файл данных P.PIK описан в приложении 2.

В приложении 3 показан результат работы программы PIK на тестовом примере.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 1

### Полный текст программы PIK

```
PROGRAM PIK
COMMON/Y/X(150),YE(150),YT(150),DYE(150)
DIMENSION B(8),D(8),A(8,9),DD(8),Z(7),
*BZ(7),AZ(7),PN(60),HO(60),EY(60),O(3)
BYTE CL(4)
COMMON/PIK/DT,RR,POL(60),SN(60),DN(60)
COMMON/XH/H1,H2,AL,BB,GK,GT,GM,L1,NOOM,NL,NSM
COMMON/DER/NS,SP(4096)
COMMON/FYL/IQ,IFILE(17)
EQUIVALENCE (AZ(1),H1)
DATA CL/27,1HN,27,1BJ/
```

```

0054  FORMAT(X4A1,3X,10(1H*),' PIK V.',I4,' 28.04.90 ',10(1H*),'
      /*/,4X,'результаты обработки будут записаны в файл DK:P.LST'
      *,//4X,25(1H*)//)
      CALL ASSIGN(11,'DK:P.PIK',8,'OLD')
      READ(11,113)IQ,IFILE
      READ(11,111)(Z(I),I=1,7)
      READ(11,111)(BZ(I),I=1,7)
      READ(11,112)ITIP,NS,NSM,MK,NBZ,DT,RR
      IF(NBZ.NE.0)GOTO 9511
      TYPE 9510
9510  FORMAT(1X,' номер калибровки...')
      ACCEPT *,NBZ
9511  DO 121 J=1,NBZ
0121  READ(11,110)(O(I),I=1,3)
      CALL CLOSE(11)
0110  FORMAT(/1X,F9.3,2X,F6.4,2X,E13.6)
0111  FORMAT(/1X,7(F5.3,1X))
0112  FORMAT(/,5(1X,I4),1X,F2.0,1X,F4.1)
0113  FORMAT(1X,Q,17A2)
1993  CALL WDR(ITIP)
      TYPE 54,CL,JSP
      CALL POISK(IP)
      IF(IA.NE.8)CALL ASSIGN(17,'DK:P.LST',8)
      WRITE(17,44)IQ,IFILE
0044  FORMAT(1X,'Imq fajla: ',Q,17A2)
      WRITE(17,31)
0033  FORMAT(1X,' N% XO E(KEV) SIG HO
      *S DS')
      DO 200 I=1,IP
      NM=POL(I)
      PL=POL(I)
      IF(SP(NM+1).GT.SP(NM))NM=NM+1
      AP=SP(NM)
      S=3
      J=4*S
      DFON=(SP(NM+J)+SP(NM-J)-(AP-SP(NM-J))*Z(2))/2.
      G=SP(NM+1)-SP(NM-1)
      BO=AP
      HO(I)=BO-DFON
      S=SN(I)/HO(I)/(1.+Z(1))/2.506628
      PN(I)=S
      IF(HO(I).LE.10.)PN(I)=PN(I-1)
      IF(HO(I).LE.10.)HO(I)=SN(I)/PN(I)/(1.+Z(1))/2.506628
0200  EY(I)=O(1)+O(2)*PL+O(3)*PL*PL
0034  FORMAT(1X,' N L1 - L2 XO L DL HO
      *DHO S DS HI IT')
0199  CONTINUE
      DO 217 I=1,IP
      L13=0
      IF(I.EQ.21.OR.I.EQ.42.OR.I.EQ.63)PAUSE
      IF(I.EQ.1.OR.I.EQ.21.OR.I.EQ.42.OR.I.EQ.63)L13=1
      IF(L13.EQ.1)TYPE 3111,CL
      IF(L13.EQ.1)TYPE 33
      IF(L13.EQ.1)TYPE 31
0217  TYPE 119,I,POL(I),EY(I),PN(I),HO(I),SN(I),DN(I)
3111  FORMAT(X4A1,7O(1H.))
0119  FORMAT(1X,I4,F8.2,2X,F7.2,2X,F6.3,2X,F7.0,2X,F8.0,

```

```

*('',P6.0,')')
TYPE 116
0116 FORMAT(1X,'просмотр таблицы еще раз-0',/
*1X,'какой пик обработать?')$)
ACCEPT *,K
IF(K.EQ.0)GOTO 199
TYPE 98,01
0098 FORMAT(X4A1,4X,'варианты обработки пика ? ',/,
*1X,50(1H-),/,
*5X,'автомат. обработка выбранного пика -----0',/,
*5X,' ручная обработка, границы автомат.-----1',/,
*5X,' ручная обработка, границы вручную.-----2',/,
*5X,'обработка всех пиков автомат -----3',/,
*5X,'обработка борного пика -----4',/,
*5X,' ручная обработка, границы автомат.-----5',/,
*5X,' ручная обработка, границы вручную.-----6',/,
*5X,'нахождение параметров H1,H2 и ALPHA -----7',/,
*5X,'другой спектр -----8',/,
*5X,'STOP -----9')
ACCEPT *,IA
IF(IA.EQ.8)GOTO 1993
IF(IA.EQ.9)GOTO 193
WRITE(17,32)
WRITE(17,34)
WRITE(17,32)
IF(IA.EQ.3)K=K-1
NCOM=0
IF(IA.EQ.7)NCOM=1
0189 CONTINUE
IF(IA.EQ.3)K=K+1
IF(K.GT.IP)GOTO 193
M=5
M=M+1
9401 DO 9401 II=1,7
AZ(II)=Z(II)
B(1)=PN(K)
B(2)=POL(K)+B(1)*Z(1)*0.85
B(3)=HO(K)
GOTO(195,195,195,195,196,196,196,195,193),IA+1
0196 DO 9402 II=1,7
9402 AZ(II)=BZ(II)
B(1)=B(1)*0.606531
B(2)=POL(K)+B(1)
B(3)=HO(K)/1.2131
0195 CONTINUE
L1=B(2)-10.*B(1)
L2=B(2)+8.*B(1)
Q1=POL(K-1)
Q2=POL(K)
Q3=POL(K+1)
IF(K.EQ.IP)Q3=NS
IF(L1.LE.Q1+3.*B(1))L1=Q1+(Q2-Q1)*0.5+1
IF(L2.GE.Q3-3.*B(1))L2=Q2+(Q3-Q2)*0.5+1
GOTO(172,1172,1172,172,172,176,176,172),IA+1
1172 TYPE 174
0174 FORMAT(1X,'ввести SIG,H1,H2,ALFA --P5.3')
READ(5,99)B(1),H1,H2,AL

```

```

GOTO 177
0176 TYPE 175
0175 FORMAT(1X,'ввести СИГ,Н2,АЛФА --F5.3')
      READ(5,99)B(1),H2,AL
0099 FORMAT(F5.3)
0177 IF(IA.EQ.1.OR.IA.EQ.5)GOTO 172
      TYPE 202
0202 FORMAT(1X,'ввести нач. канал и кон. канал--I4')
      READ(5,203)L1,L2
0203 FORMAT(I4)
0172 NT=L2-L1+1
      L3=L1-1
      DO 320 I=1,NT
      L=L3+I
      YE(I)=SP(L)
      X(I)=L
      DYE(I)=YE(I)
      IF(DYE(I).EQ.0.0)DYE(I)=1.
0320 CONTINUE
      B(4)=(YE(1)+YE(2)+YE(3))/3.-B(3)*H2
      B(5)=((YE(NT)+YE(NT-1)+YE(NT-2))/3.-B(4))/FLOAT(NT-2)
      B(6)=H1
      GOTO(333,333,333,191,333,333,333,334,193),IA+1
0334 M=8
      M1=M+1
      B(7)=H2
      B(8)=AL
0333 CONTINUE
      TYPE 28,(B(I),I=1,6)
      IF(IA.EQ.7)TYPE 28,(B(I),I=7,8),BB,GK,GT,GM
      IF(IA.NE.7)TYPE 28,H2,AL,BB,GK,GT,GM
      IF(NEM.EQ.0)GOTO 191
      NL=1
      GOTO 1200
0191 CONTINUE
      CALL UMNK(MK,M,M1,NN,NT,B,D,DD,XI,A)
0031 FORMAT(1X,70(1H.))
0032 FORMAT(1X,79(1H=))
      SP=2.506628*B(1)*B(3)*(1.+B(6))
      QF=2.506628*B(1)*B(3)
      IF(IA.NE.7)DD(6)=0.
      DS=SQRT((SP*DD(3)/B(3))**2+(SF*DD(1)/B(1))**2+
      *(QF*DD(6))**2)
      CALL SGS(B,DD,NT,SSS,DSSS)
      DD1=DD(1)*2.3548
      B1=B(1)*2.3548
      TYPE 22,K,L1,L2,B(2),DD(2),B1,DD1,B(3),DD(3),SP,DS,XI,NN
      IF(IA.EQ.3)WRITE(17,22)K,L1,L2,B(2),DD(2),B1,DD1,
      *B(3),DD(3),SSS,DSSS,XI,NN
      IF(IA.NE.3)WRITE(17,22)K,L1,L2,B(2),DD(2),B1,DD1,
      *B(3),DD(3),SP,DS,XI,NN
0022 FORMAT(1X,I2,'(','I4','-','I4,')',F7.2,'(','F5.2,')',
      *F5.2,'(','F5.2,')',F7.1,'(','F5.1,')',F8.1,'(','
      *F5.1,')',F5.2,I2)
      IF(IA.NE.3)PAUSE
      IF(IA.EQ.3)GOTO 189
      WRITE(17,31)

```

```

WRITE(17,28)(B(I),I=1,6)
WRITE(17,29)(DD(I),I=1,6)
IF(IA.EQ.7)WRITE(17,28)(B(I),I=7,8),BB,GK,GT,GM
IF(IA.EQ.7)WRITE(17,29)(DD(I),I=7,8)
IF(IA.NE.7)WRITE(17,28)H2,AL,BB,GK,GT,GM
WRITE(17,31)
DP=DSSS/SSS*100.
WRITE(17,10)SSS,DSSS,DP
0010 FORMAT(1X,'S=',F9.0,1X,'(',F8.0,')',2X,F7.2,'(%)')
IP(NSM.EQ.0)GOTO199
NL=2
1200 CONTINUE
IF(NL.EQ.2.AND.NSM.EQ.1)CALL ASSIGN(1,'DK:T.LST',8,'NEW')
DO 12 L=1,NL
CALL F(M,B,X(L),YT(L),D)
Q=SQRT(DYE(L))
SS=YE(L)-YT(L)
ST=SS/Q
TYPE 30,X(L),YE(L),YT(L),SS,ST,Q
0012 IF(NL.NE.1)WRITE(17,30)X(L),YE(L),YT(L),SS,ST,Q
IF(NL.EQ.2.AND.NSM.EQ.1)CALL CLOSE(1)
0028 FORMAT(1X,'PAR',6F11.3)
0029 FORMAT(1X,'DPAR',6F11.3)
0030 FORMAT(1X,F5.0,1X,5(F10.2,1X))
GO TO(191,199),NL
0193 CONTINUE
WRITE(17,32)
CALL CLOSE(17)
STOP
END
SUBROUTINEF(M,B,X,Y,DY)
DIMENSION B(M),DY(M)
COMMON /XH/H1,H2,AL,BB,GK,GT,GM,NH,NOOM,NL,NSM
PI=3.1415926
B=B(2)+2.*B(1)
X1=X-B(2)
XA=EXP(X1/B(1)*X1/B(1)/(-2.))
O=B(1)*B(1)
D=O*B(1)
W=B(1)*2.3548
XC=GM*(X1+GK*B(1))/B(1)
TC=1.570796-ATAN(XG)
XD=1.+BB*(X-NH)/B(1)
U=XC*XC+1
DY(4)=1.
DY(5)=X-NH
IF(NCOM.NE.0)GOTO 111
R=B(2)-GT*B(1)-AL*W
IF(X.GT.E)GOTO13
IF(X.LE.R)GOTO3
XB=EXP((X1+B(1)*GT)*(X1+B(1)*GT)/(-2.)/C)
YY=H1*XB*X1*(X1+GT*B(1))/D
YX=H1*XB*(X1+GT*B(1))/C
GOTO4
0003 XB=EXP(AL*W*(X1+GT*B(1)+AL*W/2.)/C)
YY=H1*2.3548*AL/C*(-XB)*X1
YX=-H1*AL*W*XB/C

```

```

0004  XB=XD/PI*TO
      Y=(XA+H1*XB+H2*XE)*B(3)+B(4)+B(5)*(X-NH)
      IF(NL.EQ.2.AND.NSM.EQ.1)
      *WRITE(1,99)X,Y,B(3)*XA,B(3)*H1*XB,B(3)*H2*XE,B(4)+
      *B(5)*(X-NH)
0099  FORMAT(P5.0,1X,5(P10.4,1X))
      DY(1)=(X1*X1/D*XA+H2*BB/PI*(NH-X)*TO/C+
      *H2*XD/U*GM/O*X1/PI+YY)*B(3)
      DY(2)=(X1/O*XA+H2/PI*GM/B(1)*XD/U+YX)*B(3)
      DY(3)=XA+H1*XB+H2*XE
      GOTO7
0013  Y=B(4)+B(5)*(X-NH)+B(3)*XA
      IF(NL.EQ.2.AND.NSM.EQ.1)
      *WRITE(1,99)X,Y,B(3)*XA,O.,O.,B(4)+B(5)*(X-NH)
      DY(1)=B(3)*X1*X1/D*XA
      DY(2)=B(3)*X1/O*XA
      DY(3)=XA
0007  RETURN
0111  R=B(2)-GT*B(1)-B(8)*W
      IF(X.GT.B)GOTO133
      IF(X.LE.R)GOTO33
      XB=EXP((X1+B(1)*GT)*(X1+B(1)*GT)/(-2.)/O)
      YY=B(6)*XB*X1*(X1+GT*B(1))/D
      YX=B(6)*XB*(X1+GT*B(1))/C
      GOTO44
0033  XB=EXP(ABS(B(8))*W*(X1+GT*B(1)+ABS(B(8))*W/2)/C)
      YY=B(6)*2.3548*B(8)/O*(-XB)*X1
      YX=-B(6)*B(8)*W*XB/O
0044  XB=XD/PI*TO
      Y=(XA+B(6)*XB+B(7)*XE)*B(3)+B(4)+B(5)*(X-NH)
      DY(1)=(X1*X1/D*XA+B(7)/PI*BB*(NH-X)*TO/C+
      *B(7)/PI*XD/U*GM/O*X1+YY)*B(3)
      DY(2)=(X1/O*XA+B(7)/PI*GM/B(1)*XD/U+YX)*B(3)
      DY(3)=XA+B(6)*XB+B(7)*XE
      DY(6)=B(3)*XB
      DY(7)=B(3)*XE
      DY(8)=O.
      IF(X.LI )DY(8)=B(3)*B(6)*W/O*(X1+GT*B(1)+B(8)*W)*XB
      GOTO77
0133  Y=B(4)+B(5)*(X-NH)+B(3)*XA
      DY(1)=B(3)*X1*X1/D*XA
      DY(2)=B(3)*X1/O*XA
      DY(3)=XA
      DY(6)=O.
      DY(7)=O.
      DY(8)=O.
0077  RETURN
      END
      SUBROUTINE SGS(B,D,NT,SSS,DSSS)
      DIMENSION B(8),D(8)
      COMMON/Y/X(150),YE(150),YT(150),DYE(150)
      COMMON/RH/H1,H2,AL,BB,GR,GT,GM,NH,NCOM
      TN(Z)=1.570796-ATAN(Z)
      PI=3.1415926
      Z=B(2)-3.*B(1)
      DO 2 I=1,NT
      IF(X(I).GE.Z)GOTO3

```

```

0002 CONTINUE
0003 IN=I
      I1=I-1
      Z=(X(I)+X(I1))/2.
      S1=0.
      S12=0.
      S3=0.
      DO 4 I=IN,NT
      S3=S3+YE(I)
      S1=S1+YE(I)-B(4)-B(5)*(X(I)-NH)
0004 S12=S12+D(4)**2+(X(I)-NH)**2*D(5)**2
      S13=S3+S3-S1+S12
      G=(B(2)-Z)/B(1)
      X1=G/SQRT(2.)
      X2=(G-GT)/SQRT(2.)
      SG=B(3)*B(1)*1.253314*(1.-ERF(X1))
      SMG=B(3)*H1*B(1)*1.253314*(1.-ERF(X2))
      DS=(SG**2+SMG**2)*((D(1)/B(1))**2+(D(3)/B(3))**2)
      Z2=GM*(GK+2.)
      Z1=GM*(GK-G)
      T1=Z2*TN(Z2)+ALOG(1.+Z2*Z2)/2.-Z1*TN(Z1)-ALOG(1+Z1*Z1)/2.
      T2=(1+Z2**2)*TN(Z2)/2.+Z2/2.-(1+Z1**2)*TN(Z1)/2.-Z1/2.
      SA1=B(1)*B(3)*H2/GM/PI*(1+BB/B(1)*(B(2)-NH-GK*B(1)))*T1
      SA2=B(1)*B(3)*H2*BB/GM/GM/PI*T2
      DS2=(SA1**2+SA2**2)*((D(1)/B(1))**2+(D(3)/B(3))**2)
      SA=SA1+SA2
      SSS=S1+SG+SMG-SA
      DSSS=SQRT(S13+DS+DS2)
      RETURN
      END
      FUNCTION ERF(Z)
      DIMENSION A(5)
      DATA A,P/O.254829592,-0.284496736,1.421413741,-1.453152027,
      *1.061405429,0.3275911/
      T=1./(1+P*Z)
      BU=0.
      DO 1 I=1,5
0001 BU=BU+A(I)*T**I
      ERF=1.-BU*EXP(-Z*Z)
      RETURN
      END
      SUBROUTINE POISK(IP)
      COMMON/PIK/DT,RRR,POL(60),S20(60),S30(60)
      COMMON/DER/NS,SP(4096)
      NN=7
      NK=NS-NN
      S1=1.
      IP=0
      DO 20 J=NN,NK
      S2=0.0724*(SP(J-4)-SP(J+4))-0.12*(SP(J-3)-SP(J+3))
      S2=S2-0.162*(SP(J-2)-SP(J+2))-0.106*(SP(J-1)-SP(J+1))
      IF(S1.LT.0.)GO TO 20
      IF(S2.GT.0.)GO TO 20
      II=0
      R=0.
      DO 10 JJ=J-1,J
      A4=SP(JJ-4)+SP(JJ+4)

```

```

A3=SP(JJ-3)+SP(JJ+3)
A2=SP(JJ-2)+SP(JJ+2)
A1=SP(JJ-1)+SP(JJ+1)
A0=SP(JJ)
R1=0.0123*A4+0.0548*A3+0.0827*A2-0.0544*A1-0.1934*A0
DR1=1.5E-4*A4+3.E-3*A3+6.83E-2*A2+2.96E-3*A1+3.74E-2*A0
IF(DR1.EQ.O.)GO TO 20
IF(R1.GE.O.)GOTO 10
RR=R1/SQRT(DR1)
IF(RR.LT.R)R=RR
10  CONTINUE
IF(R.GT.RRR)GO TO 20
K=J-1
L=J
SPIK=0.
STOT=SP(K)+SP(L)
DO 74 M=1,30
RPN=(SP(K-1)+SP(K-2)+SP(K-3)+SP(L+1)+SP(L+2)+SP(L+3))/3.*M
IF((STOT-RPN).LE.SPIK)GO TO 704
SPIK=STOT-RPN
RZ=RPN
K=K-1
L=L+1
STOT=STOT+SP(K)+SP(L)
74  CONTINUE
704  STOT=RZ+SPIK
IF(RZ.EQ.O.)RZ=1.
DD=SPIK/SQRT(RZ)
IF(DD.LT.DT)GO TO 20
IF(SPIK.LE.10)GOTO 20
IP=IP+1
SDE=SQRT(RZ+STOT)
S20(IP)=SPIK
IF(SPIK.NE.O)S30(IP)=SDE
20  POL(IP)=J-1+S1/(S1-S2)
S1=S2
RETURN
END
SUBROUTINE UMMK(MK,M,M1,NN,N,B,D,DD,XI,A)
COMMON/Y/X(150),YE(150),YT(150),DYE(150)
DIMENSION B(M),A(M,M1),DD(M),D(M)
K2=1000.
NN=0
37  DO 4 J=1,M
DO 4 I=1,M1
4  A(J,I)=0.
XI=0.
SI=0.
S1=0.
DO 1 L=1,N
CALL F(M,B,X(L),YT(L),D)
XI=XI+(YE(L)-YT(L))**2
SI=SI+(YE(L)-YT(L))**2/DYE(L)
DO 1 J=1,M
DO 105 I=1,M
105 A(J,I)=A(J,I)+D(J)*D(I)/DYE(L)
A(J,M1)=A(J,M1)+(YE(L)-YT(L))**2*D(J)/DYE(L)

```

```

1  CONTINUE
   IP(M.LE.1)RETURN
   CALL ROBC(M,M1,D,A)
   DO 28 J=1,M
28  DD(J)=B(J)+D(J)
   DO 23 L=1,N
   CALL F(M,DD,X(L),Y,D)
23  S1=S1+(Y(L)-Y)**2/DY(L)
   XI=SQRT(S1/FLOAT(N))
   X1=SQRT(S1/FLOAT(N))
2  FORMAT(1X,'PAR*',1X,5E13.6)
   IP(MK.EQ.1)TYPE 2,(DD(K),K=1,M)
   IP(MK.EQ.1)TYPE *,'XI=',X1
   NN=NN+1
   IF(X1.GT.X2)GOTO34
   IF(ABS(XI-X1).LE.0.001)GOTO34
   DO 36 J=1,M
36  B(J)=DD(J)
   X2=X1
   GO TO 37
34  IF(N-M)25,25,26
26  SI=SI/FLOAT(N-M)
25  DO 18 J=1,M
18  D(J)=SQRT(ABS(A(J,J))*SI)
   DO 27 I=1,M
   DO 27 J=1,M
   IF(D(I)*D(J))50,51,50
51  A(I,J)=0.
   GO TO 27
50  A(I,J)=A(I,J)*SI/(D(I)*D(J))
27  CONTINUE
   SI=SQRT(SI)
   DO 31 J=1,M
31  DD(J)=D(J)
   RETURN
   END
   SUBROUTINE ROBC(N,N1,X,A)
   DIMENSION A(N,N1),V(10),X(N)
   M1=N-1
   DO 4 K=1,N
   P=1.0/A(1,1)
   DO 5 I=2,N
   II=I-1
5  V(II)=A(1,I)
   DO 6 I=1,M1
   Y=-V(I)*P
   A(I,N)=Y
   DO 6 J=I,M1
6  A(I,J)=A(I+1,J+1)+Y*V(J)
4  A(N,N)=-P
   DO 7 I=1,N
   DO 7 J=I,N
7  A(I,J)=-A(I,J)
   DO 9 K=2,N
   K1=K-1
   DO 9 J=1,K1
9  A(K,J)=A(J,K)

```

```

DO 10 K=1,N
X(K)=0.
DO 10 J=1,N
10  X(K)=X(K)+A(K,J)*A(J,N+1)
RETURN
END
SUBROUTINE WDR(ITIP)
  BYTE CL(4)
  COMMON/FYL/IQ,IFILE(17)
  COMMON/DER/NS,SP(4096)
  DATA CL/27,1HH,27,1HJ/
  TYPE 10,CL
0010  FORMAT(X4A1,'*****
*WDR V.2 23.04.1990 *****'//)
0044  TYPE 1171
ACCEPT 17,IQ,IFILE
IF(ITIP.NE.0)GOTO 111
TYPE 1172
ACCEPT *,ITIP
0111  CONTINUE
IF(NS.NE.0)GOTO 112
TYPE 1173
ACCEPT *,NS
0112  CONTINUE
CALL ASSIGN(3,IFILE,IQ)
DEFINE FILE 3(NS,ITIP,U,NO)
DO 1 J=1,NS
GO TO (311,322),ITIP
0311  READ(3'J,ERR=67)JSP
SP(J)=FLOAT(JSP)
IF(SP(J).LT.0.)SP(J)=SP(J)+65536.
GO TO 1
0322  READ(3'J,ERR=67)SP(J)
0001  CONTINUE
CALL CLOSE(3)
0017  FORMAT(Q,17A2)
0027  FORMAT(1X,'имя файла: ',Q,17A2)
1171  FORMAT(1X,'имя файла? '$)
1172  FORMAT(1X,' целый - <1>, веществ.
:- <2> '$)
1173  FORMAT(1X,' число каналов? '$)
TYPE 27,IQ,IFILE
RETURN
0067  TYPE *,'файла нет, повторите ввод'
CALL CLOSE(3)
GOTO 44
11  RETURN
END

```

## ПРИЛОЖЕНИЕ 2

### Файл начальных параметров P.PIK

time	H1	H2	AL	BB	OK	GT	GM	
	H1	H2	AL	BB	OK	GT	GM	- (одиночный лпс)
0.115	0.016	0.237	0.000	3.500	2.000	2.600		
	H1	H2	AL	BB	OK	GT	GM	- (типс 477 ксБ)
1.000	0.065	0.700	0.000	3.500	2.000	2.600		
	ITIP	NS	NSM	MK	NKALIB	DT	RRR	- (критерий лпса)

0001 0700 0001 0000 0001 3. -1.9  
 а В С - энергетическая калибровка  $E=a+b*x+c*x^2$   
 0000.000 1.000 -0.000000E-04 - первая калибровка  
 +0000.569 0.391 -0.000000E-05 - вторая калибровка  
 -1000.000 1.000 -0.100000E-06 - третья калибровка

2 строка - название вводимых параметров

3 строка - числовые значения параметров  $h_1, h_2, \alpha, b, k, t, m$

4 строка - названия вводимых параметров для  $\gamma$ -пика из реакции  
 $^{10}B(n, \alpha_1) + 477 \text{ кэВ}$

5 строка - числовые значения параметров  $h_1, h_2, \alpha, b, k, t, m$

6 строка - название вводимых параметров

7 строка - значения параметров ITIP, NS, NSM, MK

ITIP - 1 - спектр целый (канал-слово)

2 - спектр вещественный (канал-два слова)

NS - вводимое число каналов спектра до 4096

NSM - 1 просмотр содержимого каналов экспериментального и модельного спектров,

0 - работа без просмотра;

MK - 1 - просмотр значений варьируемых параметров при каждой итерации,

0 - работа без просмотра

NGALIB - номер энергетической калибровки спектра

DT - параметр отсеивания пиков по статистической значимости (превышение площади пика над своей погрешностью), обычно равен 3

RRR - параметр превышения второй производной своей погрешности, обычно равен -1.9

9, 11, 13 строки - параметры А, В, С энергетической калибровки спектра по выражению  $E_\gamma = A + B*x + C*x^2$ .

### ПРИЛОЖЕНИЕ 3

#### Результат обработки тестового спектра

N L1 - L2	XO	DXO	L	DL	HO	DHO	S	DS
1(571-614)	595.61	(0.01)	5.53	(0.02)	9817.1	(55.8)	64478.1	(452.5)
PAR*	2.350	595.610	9817.130	24.249	-0.558	0.115		
DPAR	0.010	0.012	55.814	4.465	0.112	0.000		
PAR*	0.016	0.237	0.000	3.500	2.000	2.600		
S=	64569.	( 255.)	0.39(%)					
571.	168.00	190.23	-22.23	-1.72	12.96			
572.	193.00	192.62	0.38	0.03	13.89			
573.	203.00	195.82	7.18	0.50	14.25			
574.	194.00	200.06	-6.06	-0.44	13.93			

575.	189.00	205.60	-16.60	-1.21	13.75
576.	215.00	212.81	2.19	0.15	14.66
577.	250.00	222.12	27.88	1.76	15.81
578.	238.00	234.10	3.90	0.25	15.43
579.	287.00	249.46	37.54	2.22	16.94
580.	275.00	269.08	5.92	0.36	16.58
581.	313.00	294.09	18.91	1.07	17.69
582.	349.00	325.85	23.15	1.24	18.68
583.	362.00	366.07	-4.07	-0.21	19.03
584.	404.00	416.71	-12.71	-0.63	20.10
585.	473.00	479.93	-6.93	-0.32	21.75
586.	510.00	557.40	-47.40	-2.10	22.58
587.	609.00	647.18	-38.18	-1.55	24.68
588.	804.00	776.27	27.73	0.98	28.35
589.	1118.00	1065.81	52.19	1.56	33.44
590.	1648.00	1645.94	2.06	0.05	40.60
591.	2565.00	2586.89	-21.89	-0.43	50.65
592.	4163.00	4053.06	109.94	1.70	64.52
593.	5984.00	6078.60	-94.60	-1.22	77.36
594.	8120.00	8257.62	-137.62	-1.53	90.11
595.	9810.00	9757.04	52.96	0.53	99.05
596.	9811.00	9806.41	4.59	0.05	99.05
597.	8433.00	8295.03	137.97	1.50	91.89
598.	5871.00	5877.97	-6.97	-0.09	76.62
599.	3453.00	3483.39	-30.39	-0.52	58.76
600.	1688.00	1726.75	-38.75	-0.94	41.09
601.	729.00	714.73	14.27	0.53	27.00
602.	243.00	250.35	-7.35	-0.47	15.59
603.	75.00	76.28	-1.28	-0.15	8.66
604.	27.00	22.57	4.43	0.85	5.20
605.	11.00	8.61	2.39	0.72	3.32
606.	4.00	5.26	-1.26	-0.63	2.00
607.	3.00	4.23	-1.23	-0.71	1.73
608.	6.00	3.60	2.40	0.98	2.45
609.	6.00	3.03	2.97	1.21	2.45
610.	1.00	2.47	-1.47	-1.47	1.00
611.	5.00	1.91	3.09	1.38	2.24
612.	2.00	1.36	0.64	0.46	1.41
613.	0.00	0.80	-0.80	-0.80	1.00
614.	1.00	0.24	0.76	0.76	1.00

### Список литературы

1. Helmer R.G., Lee M.A. Analytical functions for fitting peak from Ge semiconductor detectors// Nucl. Instrum. & Methods. -1980. - Vol. 178. -P. 499-512.
2. Zlokasov V.B. A Universal method of spectrum analysis// Nucl. Instrum. & Methods.- 1977.- Vol. 143.- P. 151-156.
3. Рудчик А.Т. Обробка експериментальної інформації на ЕЦОМ.- Київ: Наук. думка, 1976.
4. Routti J.T., Prussin S.G. Photopeak method for the computer analysis of gamma-ray spectra from semiconductor detectors// Nucl. Instrum. & Methods.- 1969. - Vol. 72.- P. 125-142.
5. Кабина Л.П., Кондуров И.А. - Ленинград, 1977. - 20 с.-(Препр. ЛИЯФ им. Б.П. Константинова, N 399).
6. Кашуба И.Е., Иевлев С.М., Колотый В.В., Максимов Ю.К. Экспресс-программа обработки экспериментальных спектров. - Киев, 1983. -16 с.- (Препр./ АН УССР. Ин-т ядерных исслед.; КИЯИ-83-1).
7. Рудык А.Ф., Казимиров А.С., Кротенко А.П. Оценка радиационного состояния активной зоны реактора ВВР-М.- Киев, 1987. -39 с.- (Препр./ АН УССР. Ин-т ядерных исслед.; КИЯИ-87-3).

Научное издание

ПВРТОВ Олег Анатольевич  
МУРЗИН Артур Владимирович

ПРОГРАММА ПРЕЦИЗИОННОЙ ОБРАБОТКИ ПРОСТЕЙШИХ  
СПЕКТРОВ ГАММА-ЛУЧЕЙ

Редактор Л.Н. Троян

Подп. в печ. 30.12.93. Формат 60 90/16. Бум. офс. Офс. печ.  
Усл. печ.л. 1.25. Уч.-изд.л. 1. Тираж 160 экз. Заказ 4  
Цена 25 к.

---

СКТЕ с ЭП Института ядерных исследований АН Украины  
252028, Киев-28, проспект Науки, 47

---