

JAERI-M
5556

Ge(Li)検出器によるガンマ線
スペクトル解析法

1974年2月

笹本 宣雄・小山 謹二・田中 俊一

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

この報告書は、日本原子力研究所が JAERI-M レポートとして、不定期に刊行している研究報告書です。入手、複製などのお問い合わせは、日本原子力研究所技術情報部（茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしてください。

JAERI-M reports, issued irregularly, describe the results of research works carried out in JAERI. Inquiries about the availability of reports and their reproduction should be addressed to Division of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, Japan.

Ge(Li) 検出器によるガンマ線スペクトル解析法

日本原子力研究所東海研究所原子炉工学部

笹本宣雄・小山 謹二・田中俊一

(1974年1月17日受理)

Ge(Li) 検出器を用いて得られるガンマ線スペクトルを解析するコードを作成し解析法の検討を行なった。解析は非線形最小二乗法によるフィッティングを用いて行なった。本コードでは、スペクトル中のピークサーチからガンマ線ピークの強度、ガンマ線エネルギーおよびそれらの誤差の計算までをすべて自動的に処理することができる。なお、同時にフィッティングできるピーク数は最大10個までである。ガンマ線ピークの表示関数としてはガウス関数、ピークの低エネルギー側でガウス関数と滑らかに接続する指数関数、コンプトンエッジとガンマ線ピークの間谷間の部分を表現する Valley Count Function およびバックグラウンドを表わす2次の多項式が用いられている。

本コードを用いて解析精度を検討した結果、有意な解析結果を得るためには半値幅あたりのチャンネル数は3チャンネル以上必要であり、2つのピークからなる複合ピークを解析する場合、それらの面積が等しい場合でもピーク間隔は半値幅の半分以上は必要であることがわかった。本コードの機能を評価するため、Taによるガンマ線スペクトルの解析を行ない解析結果の検討を行なった。その結果、本コードは、一部のフィッティングパラメータを固定するという多少の制限は存在するものの、ガンマ線スペクトル解析の実用に供しうることがわかった。

Study on the Analysis of Gamma-ray Spectra with a Ge(Li) Detector

Nobuo SASAMOTO, Kinji KOYAMA, Shunichi TANAKA

Div. of Reactor Engineering, Tokai, JAERI

(Received January 17, 1974)

A code has been prepared to analyze the gamma-ray spectra by Ge(Li) detector using a fitting technique by the nonlinear least square method. With the code, the successive steps of analysis can be performed from peak search to the estimation of gamma-ray peak areas, peak locations and the errors. Gamma-ray peaks and background continua are represented in functional form by Gaussian function, exponential function connecting smoothly with Gaussian function at a certain point on the lower energy side of a gamma-ray peak, a newly defined function representing the flat background continua located between Compton edge and peak center - Valley Count Function, and a quadratic polynomial representing the ordinary background continua.

From the results of analysis with the code, it was found that to obtain the meaningful solutions in gamma-ray spectra analysis the full width at half maximum (FWHM) should contain three channels or more and the separation between peaks be larger than half the FWHM for analysis of a complex spectrum consisting of two peaks. Validity of the analysis method was tested by analysis of the gamma-ray spectra from Ta and W.

目 次

1. はじめに	1
2. ガンマ線スペクトルの解析	3
2.1 解析コードの概要	3
2.2 ガンマ線ピークとバックグラウンドの関数表示	3
2.3 Peak Shape Calibration の方法	4
2.4 ピークサーチの方法	7
2.4.1 スペクトルの平滑化	7
2.4.2 ピークサーチ	9
2.4.3 フィッティング領域の設定	11
2.5 ガンマ線スペクトルのフィッティング	12
2.5.1 多重ピークの関数表示	12
2.5.2 ガンマ線ピーク面積と誤差の評価式	14
2.5.3 隠れたピークの検出	17
3. 最小二乗法の解析精度および適用限界の検討	20
3.1 ピーク面積およびピーク中心位置の検討	20
3.2 FWHMあたりのチャンネル数のガンマ線ピーク解析結果におよぼす影響	24
4. Taからのガンマ線スペクトルの解析	28
4.1 Peak Shape Calibration の評価	28
4.2 スペクトル表示関数形の検討	31
4.3 ピークサーチ機能の検討	31
4.4 隠れたピークの検出機能の検討	31
4.5 Ta スペクトルの解析結果およびその検討	34
5. むすび	36
謝 辞	37
参考文献	38
APPENDIX A コードの流れ図	39
APPENDIX B 入力形式	43

1. はじめに

最近、高分解能のGe(Li)検出器がめざましい発展をとげ、同時に多重波高分析器の記憶容量が大幅に増大する傾向にあり、従来に比較してガンマ線測定精度は飛躍的に向上している。Ge(Li)検出器を用いることにより従来のNaI(Tl)を使った測定では分離不可能であった複数のガンマ線ピーク(full energy peak and escape peak)を個々に分離して測定することが可能となった。

このGe(Li)検出器を用いた測定は、

- 1) 原子炉遮蔽解析の基礎データとなる捕獲ガンマ線収率の測定。
- 2) 核分裂生成物の核分裂収率の測定。
- 3) 非破壊法による使用済または使用中燃料の燃焼度の測定。

といった様々の分野で盛んにとりあげられるようになってきた。そしてこれらの測定はどれもかなりの高精度を要求されるものである。

一方、Ge(Li)検出器を用いて得られたガンマ線スペクトルを、NaI(Tl)検出器によるスペクトルの場合のように応答関数を用いた解析法で解析することは不可能である。そこでこれまでに多くの人々によって最小二乗法を用いたGe(Li)検出器によるガンマ線ピークの解析法が研究されている。

それらの研究の多くは、ガンマ線ピークをガウス関数で、バックグラウンドを2次ないしは3次の多項式で表現しているのが通例である。¹⁾ バックグラウンドに関してはまれに指数関数を用いて表現している例もある。²⁾ しかしRoutti et al.³⁾ が指摘しているように、ガンマ線ピークは左右非対称な形状をしており、この非対称形状の取扱いで種々の方法が提案されている。D. C. Robinson⁴⁾ は、2つのガウス関数とarctangent関数を用いており、M. Putnum et al.⁵⁾ は、ガウス関数と多項式の積で表現している。またRutti et al.³⁾ はピークの両すそ部分をガウス関数と指数関数の組み合わせで表現している。数多くの重なり合うガンマ線ピークを含むスペクトルを精度よく解析するためにはフィッティングパラメータをできるだけ少なくすることが望ましい。この目的のために、Rutti et al.³⁾ Robinson⁴⁾ は、スペクトルのフィッティングの準備段階としてpeak shape calibrationを行ない、そこでピークの形状を表わすパラメータのガンマ線エネルギーに対する依存性を決定する。この場合、これらのパラメータはフィッティングの際に固定パラメータとして取り扱うことにより、自由パラメータの数を少なくしている。これらの多くの研究のなかで、あるものは解析を容易にするために多少の正確さを犠牲にしており、またあるものはより正確なガンマ線ピークの表示を得るためにかなり複雑な関数形の採用を強いられている。表示関数が複雑になればなる程それだけ多重ピークからなる複雑なスペクトルの解析が困難となる。そこで筆者らは、主としてFPからのガンマ線スペクトルの解析を目的として、できるだけフィッティングパラメータを少なくしてしかも実用上十分満足のできるガンマ線ピークの表示関数を用いて、ピークサーチからガンマ線エネルギーおよびガンマ線強度の計算まですべて自動的に処理できるガンマ線スペクトル解析コードを開発した。ガンマ線ピークの表示関数として、ピークの中心部および高エネルギー

側のすその部分はガウス関数を、また低エネルギー側のすその部分はガウス関数と滑らかに接続する指数関数を採用している。またピークの下に連続的に存在するバックグラウンドとして、指数関数の合成関数である Valley Count Function および 2 次の多項式を用いている。さらに本コードでは peak shape calibration の精度を上げるためにガンマ線ピーク形状を表わす形状パラメータのガンマ線エネルギーに対する依存性を 1 次および 2 次の多項式で表現している。これらの較正值 (calibrated value) は、スペクトルのフィッティングに際して解析精度を向上させるために形状パラメータの固定値として使われると同時に、それらのパラメータの初期推定値の評価およびピークサーチの場合のバックデータとして用いられる。また本コードではフィッティングパラメータのとりうる値の範囲を自由に設定することが可能である。この機能により解のもとめにくい問題、たとえばピーク面積の非常に小さいガンマ線ピークのフィッティングとか、様々の強度のガンマ線ピークが数多く重なり合っているスペクトルのフィッティングといった場合、フィッティングパラメータの範囲をあらかじめ推定された範囲に限定することにより、解の発散を防ぐことも可能となる。

本コードの機能を評価するために、 ^{137}Cs から放出される 661.6 keV のガンマ線ピークによる合成スペクトルを解析し、フィッティングの適用限界を検討した。またテストケースとして、T a - W 線源から放出されるガンマ線を約 60 cc の Ge (Li) 検出器と 8000 チャンネルの波高分析器を用いて測定して得たスペクトルの解析を行なった。

2. ガンマ線スペクトルの解析

2.1 解析コードの概要

本コードは Ge(Li) 検出器を用いて得られるガンマ線スペクトルを自動的に解析し、そこに含まれるガンマ線ピーク毎のガンマ線エネルギーおよびガンマ線強度を計算するコードである。コードの流れ図を APPENDIX A に示す。

本コード内で行なわれる解析手順は以下の通りである。

- 1) エネルギー値の正確に分かっている単一ピークを4種類以上用いて peak shape calibration を行なう。ここでガンマ線ピーク形状を表現するのに必要な形状パラメータのエネルギー依存性が多項式の形で決定される。
- 2) 解析しようとするスペクトルデータの平滑化 (smoothing) を行ない、生データに含まれる統計的変動を極力おさえる。この過程は、これにつづくピークサーチを精度良く行なうために必要不可欠である。
- 3) 平滑化スペクトルを用いて、スペクトル中に含まれる真のピークとノイズを判別して真のピークの位置の近似値を決定する。さらにこれらの真のピークを適当なフィッティング領域に区分する。ここで1つの領域に含み得るピーク数は最大10個までである。
- 4) それぞれの領域毎に、スペクトルのフィッティングを行なう。
- 5) フィッティング結果が満足のものかどうかの判定を行なう。否の判定はその領域でのフィッティングが隠れたピークを見すごしていたことを示すためにその場合にはその領域にもう一つピークを仮定してフィッティングをやりなおす。
- 6) 5) の判定が良くなってはじめて、決定されたパラメータを用いてピーク毎にピーク面積、ガンマ線エネルギーおよびそれらの解析にともなう絶対誤差が計算される。

2.2 ガンマ線ピークとバックグラウンドの関数表示

Ge(Li) 検出器を用いて得られるガンマ線スペクトルは完全な線スペクトルとしてではなく一定のひろがりを持つ連続スペクトルとして観測される。そのひろがりの原因の主要なものとしては、1) プリアンプの回路ノイズ、2) 電子-正孔対生成過程での統計的ゆらきによるものおよび3) 電子または正孔の再結合によるものなどが挙げられる。

このように一定の分布をもつガンマ線ピークのスペクトルは通常は簡単にガウス関数で表現され、バックグラウンドは2次、3次の多項式または指数関数で表現できるとされている。ところがガンマ線ピークを詳細に調べてみるとそれが完全に左右対称な形状をしてはおらず明らかにピークの低エネルギー側のすその部分でガウス関数と大きくずれていることがわかる。この部分はテイリングと呼ばれ検出器固有の特性にもとづくものである。筆者らはこのテイリング部分の形状をも考慮してピーク領域をガウス関数および低エネルギー側のある一点でガウス関数と滑らかに接続する指数関数で表現した。バックグラウンドはより高エネルギーのガンマ線によるコンプトンバックグラウンド、検出器容器など周辺機器からの散乱ガンマ線、自然放射能などから主に構成されているが、ピーク近傍でのバックグラウンドの変化はピーク自体に比較し

てはるかにゆるやかである。そこでバックグラウンドの表示関数として、2次の多項式を考え、さらにコンプトンエッジとピーク間の平坦な谷間の部分のバックグラウンドを表現する関数として Valley Count Function を定義した (cf. Fig. 2.1)。この2つの関数の組合わせにより低エネルギー領域から高エネルギー領域へとゆるやかな右下りの変化を示し、その上に平坦な谷間の部分が重ね合わされたスペクトルのバックグラウンドを適確に表現することができる。Valley Count Function (以下 VCF と略記する) は Fig. 2.1 から明らかたようにガンマ線ピークの中心に変曲点を有しその点を中心とした対称な合成関数であり、マイナス無限大で +1 に漸近し、プラス無限大において 0 に漸近する。この関数は指数部分に λ という一定の係数をもつ指数関数の組合わせで表現される。ここで λ はピーク中心位置 ($x = 0$) における勾配を表わし

$$\lambda = \frac{2}{\sigma} \quad (2-1)$$

で与えられる。上式において σ はガンマ線ピークを表現するガウス関数の標準偏差である。 σ を標準偏差とするガウス分布は、その面積の 99.7% が $|x| \leq 3\sigma$ の範囲におさまるが、その両端 $|x| = 3\sigma$ において

$$e^{-\lambda x} \cong 0.025$$

となる。すなわち λ を (2-1) 式のように与えることにより $|x| \leq 3\sigma$ の範囲で VCF はゆるやかに変化し、しかもその範囲を負の方向に越えると +1 へ、正の方向へ越えると 0 にそれぞれ急速に近づくようにすることができる。

2.3 Peak Shape Calibration の方法

ピーク形状を表現するのに必要なフィッティングパラメータ (形状パラメータ) として、ガンマ線ピークの半値幅 (FWHM)、ピーク中心からテイリング部分までの距離、VCF の高さ と ガウス関数の高さの比がここでは考えられるが、これらの値は本来、測定系固有の量でありガンマ線エネルギーに対する依存性は単調変化をするはずである。ところが実際にエネルギーの異なる何種類かの単一ピークを解析してみると形状パラメータのガンマ線エネルギー依存性が必ずしも単調な傾向を示し得ないことがわかる。十分に計数値の高い単一ピークの解析の場合はエネルギー依存性は比較的単調な変化をするということが出来るが、計数値が小さくそのために統計誤差の大きいピークとかピーク面積の異なる何種類かのガンマ線ピークが重なり合ったスペクトルを解析する場合、エネルギー依存性の単調性は必ずしも保証されない。ガンマ線スペクトルを解析する場合、ガンマ線ピークの形状パラメータがエネルギーの適当な関数値として精度よく与えられるならば、フィッティングパラメータのいくつかをその関数値に固定してスペクトルをフィッティングすることにより解析精度を向上させることが可能である。この方法は、計数値の小さいピークとか多数のピークからなる複合ピークの解析において特に有効である。そのためにはガンマ線ピークの形状パラメータのエネルギー依存性を前もって関数の形で決定しておくことが必要である。関数形を決定するにはまず完全な単一ピークでそのエネルギーが正確

にわかっているガンマ線を適当なエネルギー間隔になるように4種類以上選択してスペクトルを測定する。なお計算誤差を小さくするために測定は計数値が十分大きくなるように行なり。次に今測定した各単一スペクトル Φ ピークを(2-2)~(2-4)式に示すスペクトル表示関数を使って解析する。これらの解析の結果求められた形状パラメータを、スペクトルのチャンネル数を独立変数としてフィッティングし形状パラメータのエネルギー依存性を多項式の形で表現する。単一ピークに対するガンマ線スペクトル表示関数を以下に示す。Fig. 2.2にはピークの関数表示の様子を示す。

1) 領域 ($x > P_5$)

$$f = P_1 + P_2 (x - x_U) + P_3 (x - x_U)^2 + \frac{P_4}{2} \cdot \exp[-\lambda (x - P_5)] + P_6 \cdot \exp\left[-\frac{(x - P_5)^2}{2 P_7^2}\right] \quad (2-2)$$

2) 領域 ($P_5 \geq x > P_5 - P_8^2$)

$$f = P_1 + P_2 (x - x_U) + P_3 (x - x_U)^2 + \frac{P_4}{2} \left\{ 2 - \exp[\lambda (x - P_5)] \right\} + P_6 \cdot \exp\left[-\frac{(x - P_5)^2}{2 P_7^2}\right] \quad (2-3)$$

3) 領域 ($x \leq P_5 - P_8^2$)

$$f = P_1 + P_2 (x - x_U) + P_3 (x - x_U)^2 + \frac{P_4}{2} \left\{ 2 - \exp[\lambda (x - P_5)] \right\} + P_6 \cdot \exp\left[\frac{P_8^2 (2x - 2P_5 + P_8^2)}{2 P_7^2}\right] \quad (2-4)$$

ここで

x_U = フィッティング領域の上端

λ = ピーク中心位置における VCF の勾配

($\equiv 2/P_7$)

を表わし、 P_i ($i=1\sim 8$) は最小二乗法の解として求められるパラメータでありそれぞれの持つ意味は以下の通りである。

P_1 = バックグラウンド関数の定数項

P_2 = バックグラウンド関数の一次項の係数

P_3 = バックグラウンド関数の二次項の係数

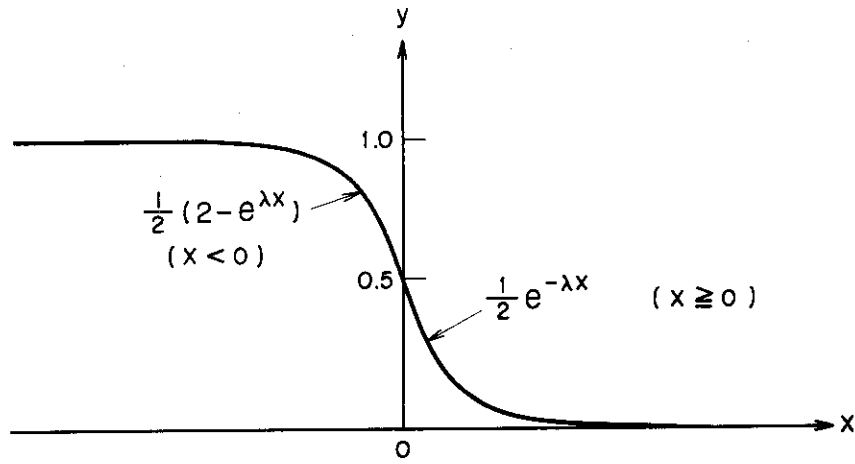


Fig.2.1 Valley Count Function(VCF)の関数表示
 $x=0$ はガンマ線ピーク中心位置を表わし, λ は
 $x=0$ におけるVCFの一次微数を表わす。

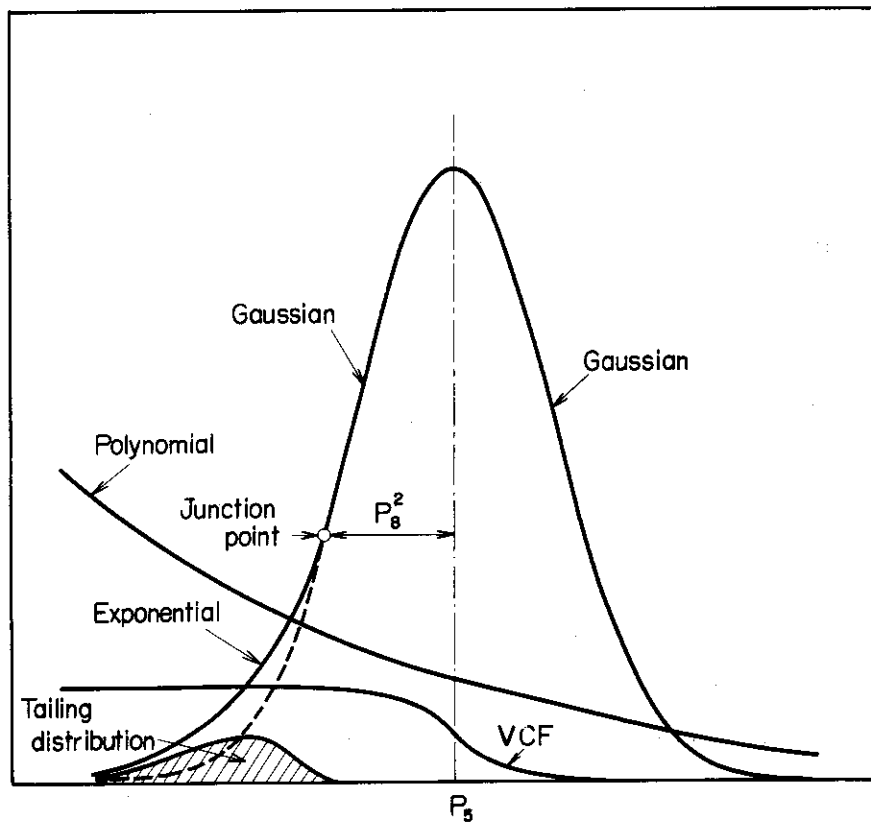


Fig.2.2 ガンマ線ピークの関数表示

P_4 = VCFの高さ(振幅)

P_5 = ガンマ線ピーク中心位置(単位:チャンネル)

P_6 = ガウス関数の高さ(振幅)

P_7 = ガウス関数の標準偏差($\cong \text{FWHM} / 2.354$)

P_8^{21} = ピーク中心からガウス関数と指数関数の接合部までの距離

上述の関数形を用いてエネルギーの異なる4種類以上のガンマ線ピークに対してフィッティングを行ない、ピーク毎の解として得られたパラメータ $P_5, P_7, P_8, P_4/P_6$ のエネルギー依存性を再びフィッティングを用いて下記の関数形で表現する。

$$P_5(x) = a_5 \cdot x + b_5 \quad (2-5)$$

$$P_7(x) = a_7 \cdot x^2 + b_7 \cdot x + c_7 \\ \equiv \sigma(x) \quad (2-6)$$

$$P_8(x) = a_8 \cdot x^2 + b_8 \cdot x + c_8 \\ \equiv \ell(x) \quad (2-7)$$

$$P_4(x)/P_6(x) = a_6 \cdot x^2 + b_6 \cdot x + c_6 \\ \equiv \varepsilon(x) \quad (2-8)$$

(2-5)~(2-8)式における独立変数 x はスペクトルのエネルギー軸であるチャンネル数に対応する。ここで $\sigma, \ell, \varepsilon$ は形状パラメータとして定義されるものでエネルギーの関数として表現される。またチャンネル数とガンマ線エネルギーとの関係は(2-5)式によって与えられる。スペクトルの解析では ℓ および ε を固定パラメータ、 σ を自由パラメータとして取扱う。なお(2-6)式によって決定される関数値は自由パラメータ σ の初期推定値として利用される。

2.4 ピークサーチの方法

2.4.1 スペクトルの平滑化

多重波高分析器で得られるガンマ線スペクトルはチャンネル毎の計数値にしたがった統計誤差を必然的に含んでいる。したがってピークサーチすなわちスペクトル中のピークの認定を精度良く行なうためにはピーク形状をなまらすことなくスペクトルを平滑化することが必要となる。本コードではA. Savitzky et al.⁶⁾の方法にしたがった平滑化を行なった。この方法の概略を次に示す。

多重波高分析器で得られたあるチャンネル ℓ の測定値が、そのチャンネルを中心とした左右 $2m+1$ 個のチャンネルの計数値を通る n 次の線形多項式 f_i であらわされるとすると、 f_i は次式で与えられる。

$$f_i = \sum_{k=0}^n b_k x_i^k \quad (2-9)$$

ここで $x_i = 0$ ($i = -m, -m+1, \dots, 0, \dots, m-1, m$)である。最小二乗法により

(2-9)式の多項式の係数 b_k が決定されると、チャンネル ℓ における最確値すなわち平滑化

データは(2-9)式において $x=0$ を代入することにより求められる。すなわち平滑化データは係数 b_k ($k \neq 0$) の計算は不必要となる。係数 b_k は次の正規方程式 (Normal Equation) を解くことにより求められる。

$$R \cdot B = F \quad (2-10)$$

ここで R は $[a_j \cdot a_k]$ を行列要素とする n 行 n 列のマトリックス、

$$[a_j \cdot a_k] = \sum_{i=-m}^m \left[\left(\frac{\partial f}{\partial b_j} \right)_i \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial b_k} \right)_i \right] \quad (2-11)$$

で表わされる。また B は多項式係数 b_k を要素とする n 次元ベクトル、 F は $[a_j \cdot f]$ を要素とする n 次元ベクトル、

$$[a_j \cdot f] = \sum_{i=-m}^m \left[\left(\frac{\partial f}{\partial b_j} \right)_i \cdot f_i \right] \quad (2-12)$$

である。

この方法の特長は平滑化に使用するデータが平滑化すべきチャンネルを中心に左右対称に1チャンネルずつ等間隔にとられているため、(2-11)式、(2-12)式で与えられるマトリックス要素、ベクトル要素の計算が非常に簡単になるということである。

着目しているチャンネル x_i ($i=0$) における一次微係数は、(2-9)式を使って g_i として次式で与えられる。

$$g_i = \sum_{k=1}^n k \cdot b_k x_i^{k-1} \quad (2-13)$$

ここで、 $x_i = i$ ($i = -m, -m+1, \dots, 0, \dots, m-1, m$) である。

この g_i を使って平滑化と同じ手法により b_k を決定し、(2-13)式において $x_i = 0$ を代入して g_0 を求めれば、この値がチャンネル x_i ($i=0$) における一次微係数である。この時、 g_0 を求めるにはただ b_1 だけ決定すれば良く、それ以外の係数 b_k ($k \neq 1$) を計算する必要はない。

平滑化および一次微係数の計算に際して多項式の次数 n および計算に必要なデータ数 $2m+1$ の選定が問題となる。H. P. Yule⁷⁾ によれば、ガンマ線ピークの平滑化のためにはそのピークの FWHM を越えない最大の奇数個を平滑化に必要なデータ数とするのが一番良いとされている。この平滑化の方法は適切な次数 n およびデータ数 $2m+1$ をえらぶことにより、計算された平滑化データは Ge(Li) 検出器で得られたガンマ線ピークの分解能を保存するという特長をそなえている。

本コードでは、平滑化のデータ数 $2m+1$ は、スペクトルの中間点のエネルギーに対応する FWHM をこえない奇数の最大値とした。このようにして定めた $2m+1$ の値は、エネルギー依存性をもつ FWHM の変化に応じて変化させることはせず、一つの値をスペクトルの全領域に一律に適用している。筆者らは、平滑化の場合の多項式の次数 n を4以上にすると平滑化データ

が振動を起こす場合が多く実用上問題があることを確かめた。コード内では、以下のように多項式の次数 n が設定される。

1) 平滑化の場合

$$n = 2 \quad (2m + 1 < 9)$$

$$n = 4 \quad (2m + 1 \geq 9)$$

2) 一次微分の場合

$$n = 3$$

次に、データ数が 5、次数が 2 の場合の平滑化データ f_0 、一次微係数 f_0' の計算式を示す。

$$f_0 = \frac{-3y_{-2} + 12y_{-1} + 17y_0 + 12y_{+1} - 3y_{+2}}{35}$$

$$f_0' = \frac{y_{-2} - 8y_{-1} + 0 \cdot y_0 + 8y_{+1} - y_{+2}}{12}$$

ここで y_0 は平滑化、一次微分の対象となるチャンネルの測定値、 y_{-j} 、 y_{+j} ($j=1, 2$) はその前後のチャンネルの測定値である。上式に含まれる定数係数は、A. Savitzky et al.⁶⁾ によって数表として用意されているため、平滑化および一次微分に必要な係数は次数とデータ数を指定するだけで利用することができる。

2.4.2 ピークサーチ

ピークサーチというのは、ガンマ線スペクトルからノイズをふるいおとして真のピークだけを選び出す操作であり、以下の 3 条件を満足する場合のみ真のピークと見なされる (cf. Fig 2.3)。ただしピークサーチの対象となるのは生データのスペクトルではなく、平滑化スペクトルである。

ピーク認定の 3 条件は以下の通りである。

- 1) 独立変数が正の方向に変化する時、一次微係数の符号がゼロを横切ってプラスからマイナスへ変化的こと。この時、微係数が x 軸と交差するチャンネルを x_p とする。
- 2) チャンネル x_p の直前直後の一次微係数の極大値、極小値の絶対値のうちの大きい方の値 $|Y'|_{\max}$ が後述の閾値 V_{th} よりも大きいこと。すなわち

$$|Y'|_{\max} \geq V_{th}$$

- 3) チャンネル x_p を間にはさむ一次微分の極大値と極小値の間に含まれるチャンネル数を N_p とし、チャンネル x_p における FWHM を F_w とした時、

$$0.8 F_w \leq N_p \leq 3.0 \cdot F_w$$

であること。

ここで閾値 V_{th} は次の様にして決められる。多重波高分析器で得られる単一ピークはピーク中心近傍において一般には次式で近似できる。

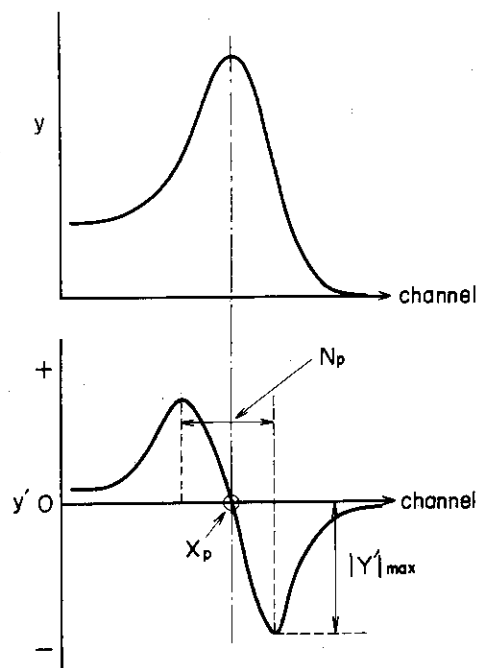


Fig. 2.3 測定値の平滑化データおよびその一次微係数を用いたピーク認識方法

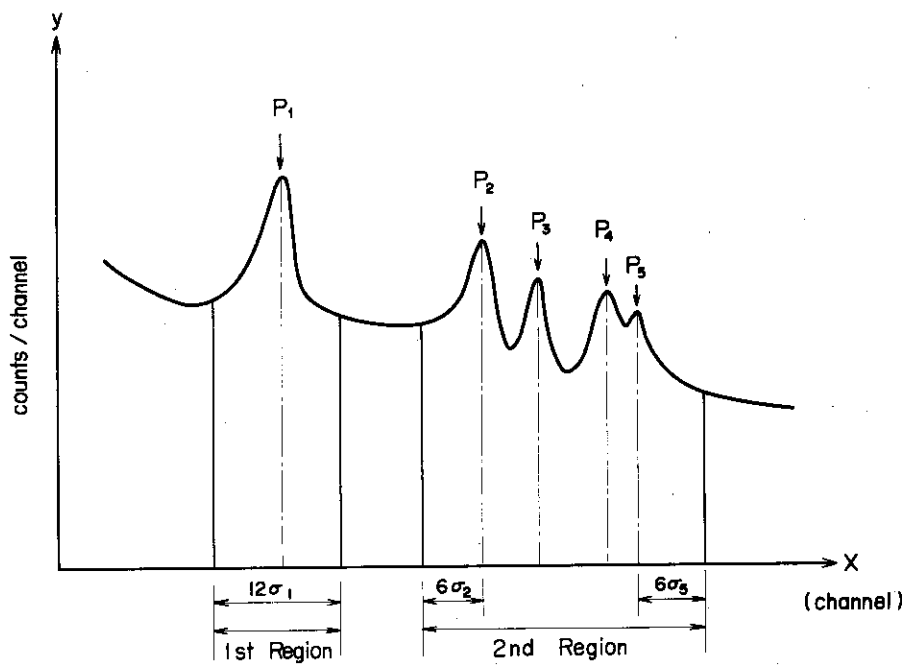


Fig. 2.4 フィッティング領域の設定の方法。 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_5$ はピーク 1 (P_1), ピーク 2 (P_2), ピーク 5 (P_5) の位置におけるガウス関数の標準偏差である。

$$Y(x) = A \cdot G(x) + C(x) \quad (2-14)$$

ここで、 $G(x)$ = ガウス関数

A = 定数係数

$C(x)$ = バックグラウンド関数

である。一般には

$$\frac{dC(x)}{dx} \ll \frac{dG(x)}{dx}$$

であるために、

$$Y'(x) \cong A \cdot G'(x) \quad (2-15)$$

が成立する。ここで G'_{max} をガウス関数の一次微係数の絶対値の最大値、 G_{max} をガウス関数の最大値とすると、これらの変数を使って新たな関数 $R(x)$ を導入する。

$$\begin{aligned} R(x) &= G'_{max} / G_{max} \\ &= e^{-0.5} / \sigma(x) \end{aligned} \quad (2-16)$$

ここで $\sigma(x)$ は、ガウス関数の標準偏差である。(2-16)式を用いると(2-15)式は次の様に書き改められる。

$$|Y'|_{max} \cong A \cdot G_{max} \cdot R(x_p) \quad (2-17)$$

ここで x_p はピークサーチにより決定されたピーク中心位置の近似値である。(2-17)式と、ピークであるための条件としてガウス関数で表現されるピークの高さが測定値の統計誤差の n 倍よりも大きくならなければならないということから次の条件式を得る。

$$\begin{aligned} A \cdot G_{max} &\cong |Y'|_{max} / R(x_p) \\ &\geq n \cdot \sqrt{Y(x_p)} \end{aligned} \quad (2-18)$$

$$|Y'|_{max} \geq n \cdot R(x_p) \sqrt{Y(x_p)} \quad (2-19)$$

したがって、ピーク判定の第2条件に含まれる閾値は、

$$V_{th} = n \cdot R(x_p) \sqrt{Y(x_p)} \quad (2-20)$$

となる。ここで n は任意の正整数であり、この値を適当に変えることによりピークサーチの感度の調節が可能である。もし(2-19)式において $|Y'|_{max}$ が A. Savitzky et al.⁶⁾ の方法で極めて正確に与えられるならば $n = 3$ 程度が妥当であるが、実際はそれ程の正確さは期待できないので $|Y'|_{max}$ の不確定さを考慮して本コードでは $n = 5$ を与えている。

2.4.3 フィッティング領域の設定

ピークサーチによりピーク位置の近似値が決定されるとその次はフィッティング領域すなわち同時にフィッティングを行なう必要のあるスペクトルの範囲を決定しなければならない。隣り合う二つのピークが近接している場合、これら二つのピークをそれぞれ独立のピークとして別個に解析するよりは二つのピークを一緒に解析する方が誤差は少ない。なぜならば各々のピークの形状は互いに相手のピーク形状の上に無視できない影響をおよぼしているからである。そこで筆者らはフィッティング領域の設定を以下の2つの観点にもとづいて行なった。

- 1) バックグラウンドを除く隣り合うピークのすその重複が事実上無視できるのかどうか。
- 2) フィッティングを行なう場合、有効な測定点が多い程有利であるため、領域は他のピークの分布の影響を受けない範囲でできるだけ広くとる。

任意のピークに着目してそのピークを表現するガウス関数の標準偏差を σ としてピークの前後 6σ をそのピーク自身の固有の領域とする。この時隣り合う二つのピークの固有の領域が互いに重複した場合、この二つのピークは同一フィッティング領域に含まれると考える。すなわち隣り合うピークのフィッティング領域が重複しない場合にはそれぞれのピークはフィッティング領域を異にする単一ピークとみなし、隣り合うピーク固有の領域がつぎつぎに重複する場合それらのピークはすべて同一のフィッティング領域に含まれることになる。ただし本コードでは同一領域に含み得るピーク数は最大10個である。Fig. 2.4に示される例ではピーク1は単一ピークとみなされ、そのフィッティング領域はピーク1の中心位置を中心にして $12\sigma_1$ の大きさを有する。ピーク2, 3, 4, 5は同一領域に含まれその領域はピーク2の中心から低エネルギー側へ $6\sigma_2$ 移した位置からピーク5の高エネルギー側へ $6\sigma_5$ 移した位置までである。ここで σ_i ($i=1, 2, 5$) はそれぞれピーク i を表現するガウス関数の標準偏差であり、その値は(2-6)式からもとめることができる。

2.5 ガンマ線スペクトルのフィッティング

2.5.1 多重ピークの関数表示

ガンマ線スペクトルの解析によって得られる結果はガンマ線エネルギーとピーク面積およびそれらの結果の解析にもなり誤差である。ピークサーチによってピーク位置の近似値が決定され、フィッティング領域およびその中に含まれるガンマ線ピークの総数が決定されると、次に以下に示す表示関数を用いて最小二乗法によりその領域のスペクトル解析が行なわれる、単一ピークに対する表示関数は(2-2)~(2-4)式で与えられており、次に示す(2-21)~(2-23)式は、それらに対応する多重ピークに対する表示関数である。

$$1) \quad x > P_{5j}$$

$$f = P_1 + P_2 (x - x_U) + P_3 (x - x_U)^2$$

$$+ \sum_{j=1}^{np} \left\{ \frac{P_{5j-1}}{2} \cdot \exp \left[-\lambda (x - P_{5j}) \right] \right.$$

$$\left. + P_{5j+1} \cdot \exp \left[-\frac{(x - P_{5j})^2}{2P_{5j+2}} \right] \right\} \quad (2-21)$$

$$2) P_{5j} \geq x > P_{5j} - P_{5j+3}^2$$

$$f = P_1 + P_2 (x - x_U) + P_3 (x + x_U)^2 + \sum_{j=1}^{np} \left\{ \frac{P_{5j-1}}{2} (2 - \exp[\lambda (x - P_{5j})]) + P_{5j+1} \cdot \exp\left[-\frac{(x - P_{5j})^2}{2 P_{5j+2}^2}\right] \right\} \quad (2-22)$$

$$3) x \leq P_{5j} - P_{5j+3}^2$$

$$f = P_1 + P_2 (x - x_U) + P_3 (x - x_U)^2 + \sum_{j=1}^{np} \left\{ \frac{P_{5j-1}}{2} (2 - \exp[\lambda (x - P_{5j})]) + P_{5j+1} \cdot \exp\left[-\frac{P_{5j+3}^2 (2x - 2P_{5j} + P_{5j+3}^2)}{2 P_{5j+2}^2}\right] \right\} \quad (2-23)$$

ここで

n_p = フィッティング領域に含まれる全ピーク数

P_1, P_2, P_3 = バックグラウンドを表現するパラメータ

P_{5j-1} = j 番目ピークの VCF の高さ

P_{5j} = j 番目ピークのピーク中心位置 (単位: チャンネル)

P_{5j+1} = j 番目ピークのガウス関数の高さ

P_{5j+2} = j 番目ピークのガウス関数の標準偏差

($\sigma \cong \text{FWHM} / 2.354$)

P_{5j+3}^2 = j 番目ピークの、ピーク中心からガウス関数と指数関数の接合部までの距離 (単位: チャンネル)

x_U = フィッティング領域の上端位置 (単位: チャンネル)

λ = ピーク中心位置における VCF の定数勾配 ($\cong 2 / \sigma$)

j = 1, 2, ..., n_p

上記のパラメータのうちで P_{5j+3} ($\cong \ell$) および P_{5j-1} / P_{5j+1} ($\cong \varepsilon$) は、peak shape calibration によりエネルギーの関数として与えられている。スペクトルの解析においては P_{5j+3} は (2-7) 式から求められる値 $\ell(x)$ に固定され、 P_{5j-1} はフィッティングの結果求める P_{5j+1} の値と、(2-8) 式で与えられる $\varepsilon(x)$ とから計算される値に固定される。また P_{5j+2} は自由パラメータとして取扱われ peak shape calibration から得られる σ の値は P_{5j+2} の初期推定値として用いられる。

バックグラウンド部分の測定値はピーク中心の測定値にくらべて数桁以上小さいのが通例である。この測定値をそのままの形で解析に用いると測定値の大きなピーク中心のデータのみが強調されて解析結果はほとんどこの部分のデータで決定されてしまい、バックグラウンドのフィッティングが不正確になる可能性がある。したがってフィッティング領域内のすべてのデータが正しく解析結果に反映されるようにする目的で本コードではデータ毎の重み (Weight) としてそのチャンネルにおけるデータの逆数を与えることとした。

非線形最小二乗法では正規方程式を立てる時、表示関数のパラメータについての線形化を行っており、その解法にはくり返し計算による逐次近似解法が用いられている。そのためパラメータの初期推定値が線形化の成り立つ領域を逸脱するような値をとる場合は、解の収束性が悪くなったり場合によっては解の発散を生ずることがある。したがってパラメータの初期推定値は可能な限り正確に与えることが必要である。本解析で用いられているパラメータ P_i の初期推定値 $P_{0,i}$ は以下に示す式でそれぞれ与えられる。

$$P_{0,1} = Y(x_L)$$

$$P_{0,2} = (Y(x_L) - Y(x_U)) / (x_L - x_U)$$

$$P_{0,3} = 0.0$$

$$P_{0,5j-1} = \varepsilon(x_p) \cdot P_{0,5j+1}$$

$$P_{0,5j} = x_p$$

$$P_{0,5j+1} = |Y'|_{\max} / R(x_p)$$

$$P_{0,5j+2} = \sigma(x_p)$$

$$P_{0,5j+3} = \ell(x_p)$$

ここで $Y(x)$ は x チャンネルにおける計数值、 x_L , x_U はフィッティング領域の上端、下端位置、 x_p はピークサーチで決定されたピーク中心位置の近似値である。 $\sigma(x)$, $\ell(x)$, $\varepsilon(x)$, $R(x)$ は、それぞれ (2-6), (2-7), (2-8), (2-16) 式で与えられる。

2.5.2 ガンマ線ピーク面積と誤差の評価式

スペクトルを解析してフィッティング領域に含まれる各ピークのパラメータの値が決定されると、それらの値を用いてピーク毎のピーク面積とそれの解析誤差が次のようにして求められる。既に述べたようにガンマ線ピークはガウス関数で表現できるような左右対称な形状をしてはならず低エネルギー側のその部分がテイリングによりガウス関数からずれており、この部分を関数で表現するためにガウス関数と連続な指数関数を用いている。したがってガンマ線ピーク面積として次の3種類を考え、それぞれについてピーク毎の面積とその誤差の評価を行なった。

- 1) GS = ガウス関数と指数関数とで表わされるピーク面積。
- 2) G = ガウス関数のみで表わすピーク面積。
- 3) S = GS - G

Sは実際のピーク面積とガウス関数分布とのずれの程度を表わす量で、これはGe(Li)検出器固有の特性にもとづくものである。

パラメータの添字を、2.5.1節で用いた表示方法にしたがって与えるとする、フィッティング領域内の第j番目のピークの面積は以下のように表わせる。

$$\begin{aligned}
 GS_j &= P_{5j+1} \int_{-\infty}^{P_{5j} - P_{5j+3}^2} \exp \left[-\frac{P_{5j+3}^2 (2x - 2P_{5j} + P_{5j+3}^2)}{2P_{5j+2}^2} \right] dx \\
 &\quad + P_{5j+1} \int_{P_{5j} - P_{5j+3}^2}^{\infty} \exp \left(-\frac{(x - P_{5j})^2}{2P_{5j+2}^2} \right) dx \\
 &= P_{5j+2} \cdot P_{5j+1} \left\{ \frac{P_{5j+2}}{P_{5j+3}^2} \exp \left(-\frac{P_{5j+3}^4}{2P_{5j+2}^2} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{P_{5j+3}^2}{\sqrt{2} P_{5j+2}} \right) + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right] \right\} \quad (2-24)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G_j &= P_{5j+1} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{(x - P_{5j})^2}{2P_{5j+2}^2} \right] dx \\
 &= \sqrt{2\pi} \cdot P_{5j+2} \cdot P_{5j+1} \quad (2-25)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_j &= GS_j - G_j \\
 &= P_{5j+2} P_{5j+1} \left\{ \frac{P_{5j+2}}{P_{5j+3}^2} \exp \left(-\frac{P_{5j+3}^4}{2P_{5j+2}^2} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{P_{5j+3}^2}{\sqrt{2} P_{5j+2}} \right) - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right] \right\} \\
 &= P_{5j+2} P_{5j+1} \left\{ \frac{P_{5j+2}}{P_{5j+3}^2} \exp \left(-\frac{P_{5j+3}^4}{2P_{5j+2}^2} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{P_{5j+3}^2}{\sqrt{2} P_{5j+2}} \right) \right\} \quad (2-26)
 \end{aligned}$$

ここで

$$\operatorname{erf}(\infty) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\operatorname{erf}(x) = \int_0^x e^{-t^2} dt$$

$$= \int_0^{\infty} e^{-t^2} dt - \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \operatorname{erfc}(x)$$

次に各々の面積に伴なり誤差 δ の評価式を示す。

$$\delta_{GSj}^2 = \left(\frac{\partial GS_j}{\partial P_{5j+1}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+1}^2 + \left(\frac{\partial GS_j}{\partial P_{5j+2}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+2}^2 + \left(\frac{\partial GS_j}{\partial P_{5j+3}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+3}^2$$

$$= \left(\frac{GS}{P_{5j+1}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+1}^2$$

$$+ \left\{ \sqrt{2} P_{5j+1} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{P_{5j+3}^2}{\sqrt{2} P_{5j+2}} \right) + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right] \right.$$

$$\left. + 2 P_{5j+1} \frac{P_{5j+2}}{P_{5j+3}^2} \cdot \exp \left(-\frac{P_{5j+3}^4}{2 P_{5j+2}^2} \right) \right\}^2 \cdot \delta_{5j+2}^2$$

$$+ \left[-2 P_{5j+1} \cdot \frac{P_{5j+2}^2}{P_{5j+3}^3} \cdot \exp \left(-\frac{P_{5j+3}^4}{2 P_{5j+2}^2} \right) \right] \cdot \delta_{5j+3}^2 \quad (2-27)$$

$$\delta_{Gj}^2 = \left(\frac{\partial Gj}{\partial P_{5j+1}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+1}^2 + \left(\frac{\partial Gj}{\partial P_{5j+2}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+2}^2$$

$$= \left(\frac{Gj}{P_{5j+1}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+1}^2 + \left(\frac{Gj}{P_{5j+2}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+2}^2 \quad (2-28)$$

$$\delta_{Sj}^2 = \left(\frac{\partial Sj}{\partial P_{5j+1}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+1}^2 + \left(\frac{\partial Sj}{\partial P_{5j+2}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+2}^2 + \left(\frac{\partial Sj}{\partial P_{5j+3}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+3}^2$$

$$= \left(\frac{Sj}{P_{5j+1}} \right)^2 \cdot \delta_{5j+1}^2$$

$$+ \left[2 P_{5j+1} \cdot \frac{P_{5j+2}}{P_{5j+3}^2} \exp \left(-\frac{P_{5j+3}^4}{2 P_{5j+2}^2} \right) \right.$$

$$\left. - \sqrt{2} P_{5j+1} \operatorname{erf} \left(\frac{P_{5j+3}^2}{\sqrt{2} \cdot P_{5j+2}} \right) \right] \cdot \delta_{5j+2}^2$$

$$+ \left[-2 P_{5j+1} \cdot \frac{P_{5j+2}^2}{P_{5j+3}^3} \cdot \frac{P_{5j+2}}{P_{5j+3}^2} \cdot \exp \left(-\frac{P_{5j+3}^4}{2 P_{5j+2}^2} \right) \right] \cdot \delta_{5j+3}^2 \quad (2-29)$$

ここで δ_i は最小二乗法で求められたパラメータ P_i の絶対誤差である。固定パラメータに対する誤差は、誤差行列の要素を使って求めるといふ通常の方法は適用できないので次式によって評価した。

$$\delta_i = Z_i \cdot \epsilon \quad (2-30)$$

ここで Z_i は固定パラメータ P_j の固定値であり、 ϵ は形状パラメータのエネルギー依存性を最小二乗法により求めた時に用いた収束判定条件の値である。

2.5.3 隠れたピークの検出方法

スペクトル中に含まれるガンマ線ピークの数が増加するにしたがって見た目には完全な単一ピークとしか見えないが実際は複数個のガンマ線ピークが重なり合って1つのピークを形成する可能性は増大する。このような現象は単一核種から放出されるガンマ線を高分解能の Ge (Li) 検出器を用いて測定したスペクトルにおいては起る可能性は少ないが、原子炉で照射された核燃料とかウラン箔のようにFPからのほり大な種類のガンマ線を放出する場合にはそのスペクトルは非常に複雑なものとなり見かけ上の単一ピークはかなりの数に達すると考えられる。

ところが本コードは、ピークサーチの段階では見かけ上の単一ピークの多重度を認識する機能を持ち合わせていない。そこでフィッティング結果の検定により他のピークに隠されたピークを見い出す方法を導入した。真の単一ピークと多重ピークからなる見かけ上の単一ピークの差は両者のFWHMの違いおよびフィッティングの結果評価されたスペクトル表示関数による計算値との間の系統的な残差として現われる。その典型的な例を模式的に Fig. 2.5の(I)図に示す。またその時の測定値と計算値との残差 ΔY を Fig. 2.5の(II)図に示す。Fig. 2.5の(III)図には、平滑化処理を行なった残差 ΔY を用いて以下に示す方法により決定した関数 I が示されている。すなわち

$$\begin{aligned} I_i &= +1 & \text{if } \Delta Y_i > \Delta Y_{i-1} \text{ and } \Delta Y_{i+1} > \Delta Y_i \\ I_i &= -1 & \text{if } \Delta Y_i < \Delta Y_{i-1} \text{ and } \Delta Y_{i+1} < \Delta Y_i \\ I_i &= 0 & \text{上記の条件以外の場合} \end{aligned} \quad (2-31)$$

ここで ΔY_i は i チャンネルにおける残差であり、 I_i は i チャンネルにおける関数 I の値である。

解析すべきスペクトルが表示関数によって十分よくフィッティングされていれば、残差 ΔY の絶対値は解析にともなり標準偏差のたかだか数倍の範囲におさまる。一方、本来多重ピークであるものを単一ピークとしてフィッティングした時、Fig. 2.5で明らかなように残差 ΔY には一定の傾向が見られ、かつ ΔY の絶対値のいくつかは標準偏差の数倍の範囲を越えることになる。そこでこの性質を利用してフィッティングの良否の判定を行なうことができる。すなわち、以下に示す2つの条件が満足されると、多重ピークのフィッティングを、実際のピーク数より少ないピークを仮定して行なったことを意味し、フィッティングの良否は否と判定される。

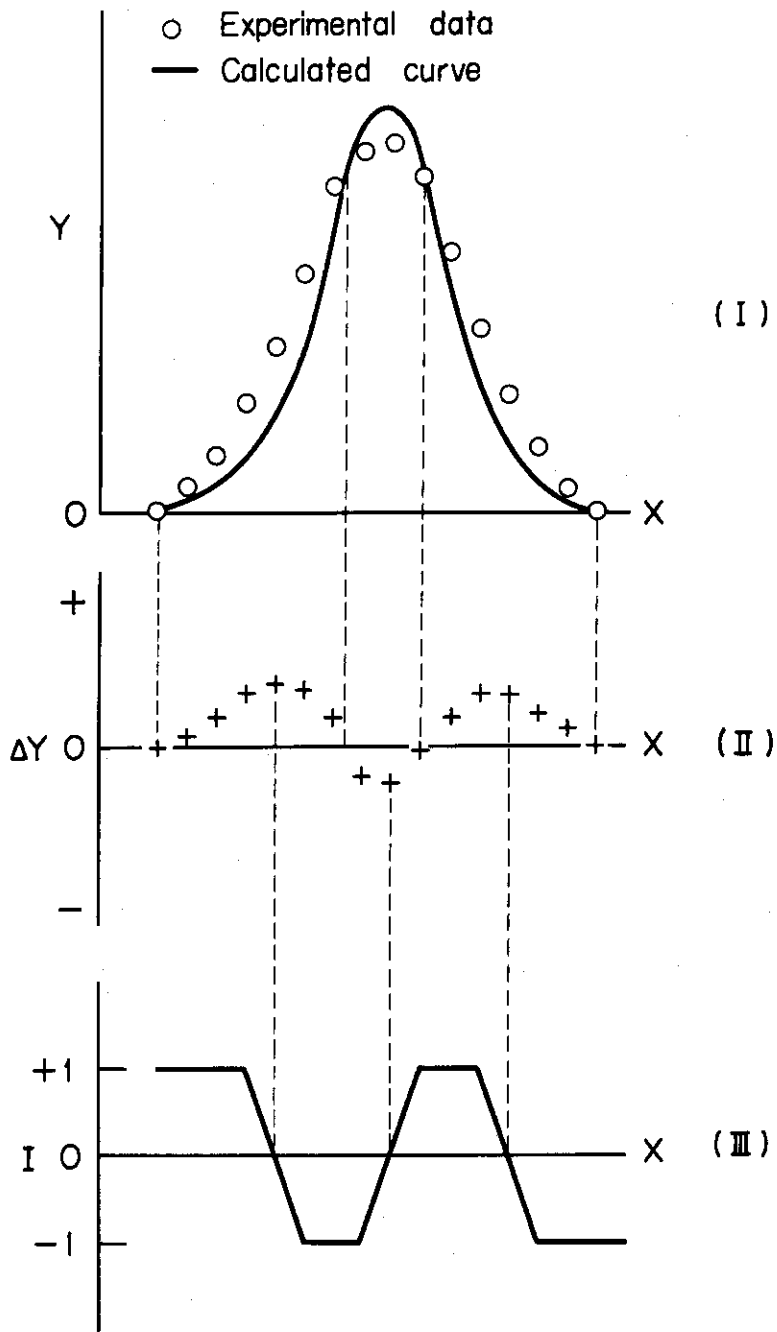


Fig.2.5 (I)：複合ピークを単一ピークとしてフィッティングした場合の解析結果。(II)：測定値と計算値の残差。(III)：(2-31)式にしたがって決定されたI。

- 1) Fig.2.5に示した I_i の符号が、チャンネル軸の増加する方向に、 $\oplus \rightarrow \ominus \rightarrow \oplus \rightarrow \ominus$ といった4ステップからなる一定の変化を示し、しかも各ステップの同符号が各々3チャンネル以上、半値幅程度の範囲で持続すること。
- 2) 残差 ΔY の絶対値の最大値を $|\Delta Y|_{\max}$ とした時、 $|\Delta Y|_{\max}$ が次の不等式を満足すること。

$$|\Delta Y|_{\max} \geq n \cdot \sqrt{\sum_i (\Delta Y_i)^2} \quad (2-32)$$

ここで、 \sum_i の i の範囲はフィッティングの領域と一致し整数 n は通常5が与えられている。もし上記の2つの条件が満足されるとそのフィッティング領域についてだけ、一つ余分にピクセルを仮定してフィッティングをやりなおす。

3. 最小二乗法の解析精度および適用限界の検討

3.1 ピーク面積およびピーク中心位置の検討

最小二乗法の解析精度はそこで用いる関数に含まれるパラメータの数およびそれらのパラメータの相関関係の強さに影響される。一般的に言えることは関数表示がうまくいってれば、必要以上にパラメータの数を多くしたりまたパラメータ間の相関関係が強くなるように関数形を選択すると解析精度は悪化する。この章では独立に測定して得た3種類のガンマ線ピークの単一ピークを使って合成した2つのピークからなるスペクトルを用いてフィッティング精度の検討を行なった。ここで合成スペクトルを作る際に考慮したパラメータは、2つのピークの間隔および2つのピークの間隔比の2種類である。合成スペクトルを作るために利用した単一ピークは ^{137}Cs から放出される661.6 keVのガンマ線によるものである。このガンマ線を約100 cpsの計数率で、計数時間を1 ksec, 2 ksec, 4 ksecとして測定した。このようにして得られたスペクトルを計数時間に対応させてそれぞれGS1, GS2, GS4と名付けることにする。これらのスペクトルのFWHMあたりのチャンネル数は、約18チャンネルである。解析すべき合成スペクトルとしてスペクトルGS4とGS1を用いて合成した面積比4:1のスペクトル(GS41と称する)、スペクトルGS2とGS4から合成した面積比2:4の合成スペクトル(GS24)およびスペクトルGS2を2個合成した面積比2:2のスペクトル(GS22)の3種類を考え、さらにそれぞれの面積比をもつ合成スペクトルについてピーク間隔がFWHMの2倍, 1.5倍, 1.0倍, 0.75倍, 0.5倍となるように合成スペクトルを作成した。したがって面積比について3種類、ピーク間隔で5種類あわせて15種類のスペクトルについて解析を行ない、それらの解析結果から精度の検討を行なった。

これらのスペクトルを解析する第一段階として peak shape calibration を行なう。このためには単一ピークのスペクトルGS1, GS2, GS4が用いられた。peak shape calibrationで求められた形状パラメータ σ , ℓ , ϵ はGS1, GS2, GS4のフィッティングの結果得られた値を算術平均したものである。またGS1, GS2, GS4のピークはすべて661.6 keVのガンマ線によるものであるため、形状パラメータ σ , ℓ , ϵ のエネルギー依存性は定数として与えられる。単一ピークの解析結果は、合成スペクトルの解析により求められるピーク毎の結果と比較するための標準値とする。

合成スペクトルの解析結果の検討項目は、①ピーク面積、②ピーク面積のフィッティングによる相対誤差および③ピーク中心位置であり、解析はⅠ) ℓ , ϵ だけを固定パラメータとした場合と、Ⅱ) σ , ℓ , ϵ を固定パラメータとした場合の2種類についておこなった。解析結果の検討は、(2-21), (2-22), (2-23)式で与えられる表示関数を用いて、①, ②, ③の各項目について、Ⅰ), Ⅱ)の条件で行なわれた。合成スペクトルを解析して求められた各ピーク面積の標準値に対するばらつきおよびピーク面積の相対誤差を、スペクトルGS22, GS24, GS41についてそれぞれFig. 3.1からFig. 3.6に示した。スペクトルGS22, GS24, GS41についてこれらの図からわかるように、ピーク間隔がFWHMの1.5倍以上あればピーク面積の標準値に対するずれの大きさは無視できる程小さい。またス

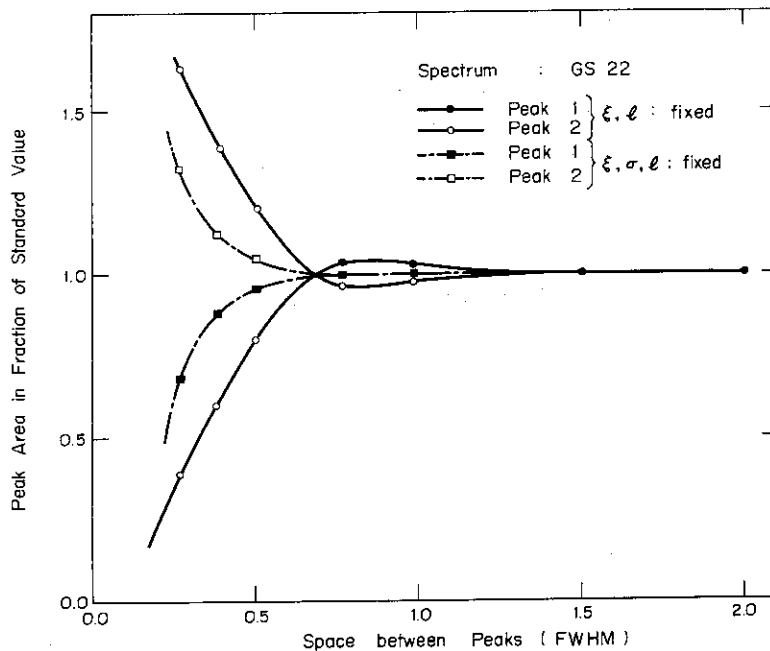


Fig. 3.1 単色ピークのフィッティングによる標準ピーク面積に対する合成スペクトルのフィッティングによるピーク面積の割合と、スペクトル中の2ピークの間隔との関係。Peak1とPeak2はそれぞれ低エネルギー側ピークと高エネルギー側ピークであり、その面積比は2 : 2である。

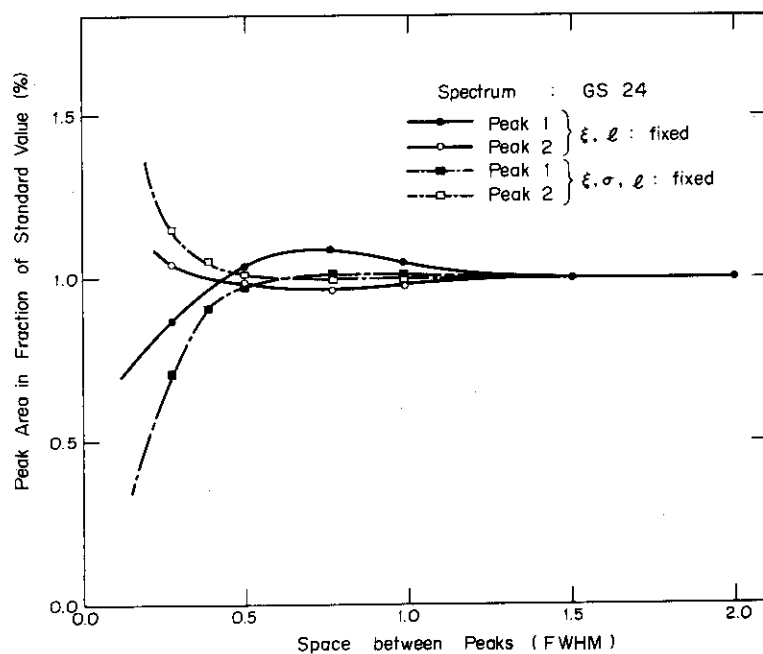


Fig. 3.2 単色ピークのフィッティングによる標準ピーク面積に対する合成スペクトルのフィッティングによるピーク面積の割合と、スペクトル中の2ピークの間隔との関係。Peak1とPeak2はそれぞれ低エネルギー側ピークと高エネルギー側ピークであり、その面積比は2 : 4である。

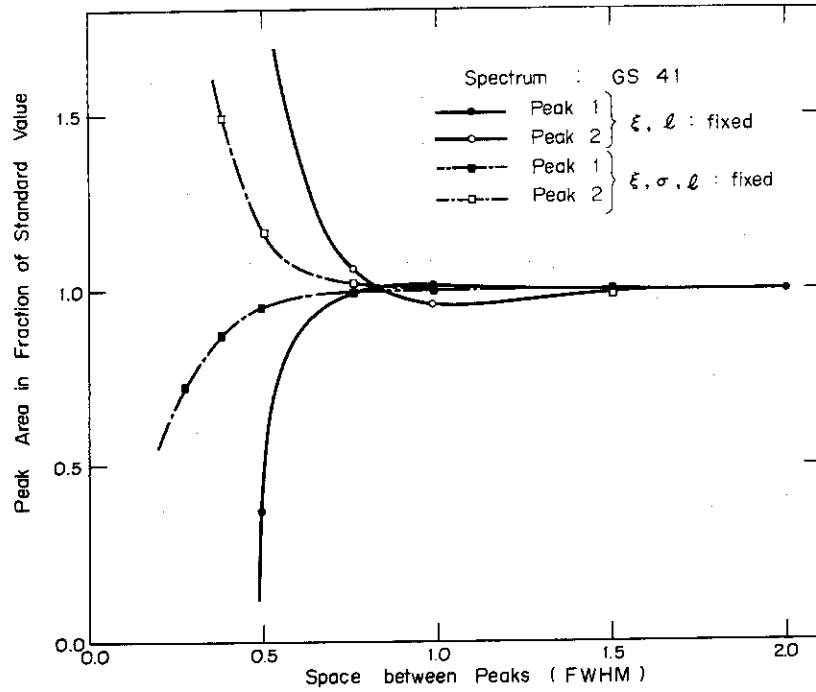


Fig. 3.3 単色ピークのフィッティングによる標準ピーク面積に対する合成スペクトルのフィッティングによるピーク面積の割合と、スペクトル中の2ピークの間隔との関係。Peak1とPeak2はそれぞれ低エネルギー側ピークと高エネルギー側ピークであり、その面積は4 : 1である。

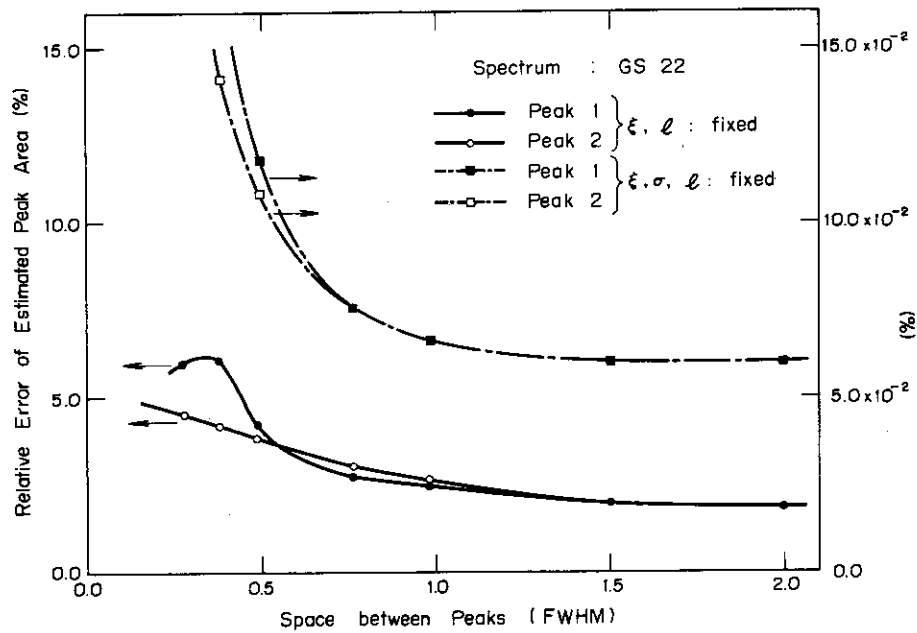


Fig. 3.4 フィッティングによるピーク面積の相対誤差と、スペクトル中の2ピークの間隔との関係。Peak1とPeak2はそれぞれ低エネルギー側ピークと高エネルギー側ピークであり、その面積比は2 : 2である。

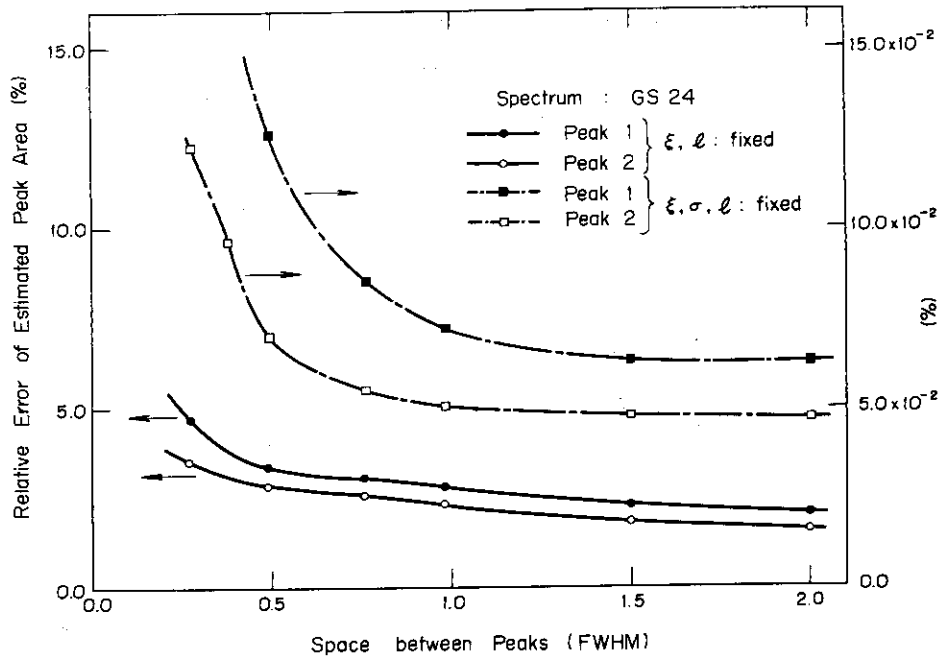


Fig. 3.5 フィッティングによるピーク面積の相対誤差と、スペクトル中の2ピークの間隔との関係。Peak1とPeak2はそれぞれ低エネルギー側ピークと高エネルギー側ピークであり、その面積比は2 : 4である。

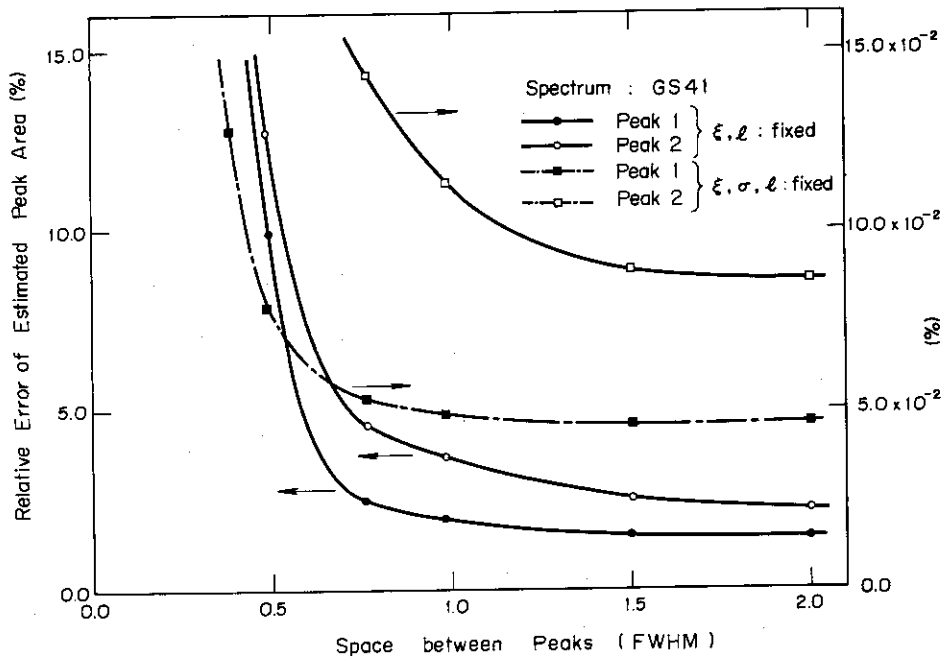


Fig. 3.6 フィッティングによるピーク面積の相対誤差と、スペクトル中の2ピークの間隔との関係。Peak1とPeak2はそれぞれ低エネルギー側ピークと高エネルギー側ピークであり、その面積比は4 : 1である。

ベクトル中のピーク間隔がFWHMの0.5倍ないし0.4倍以下であるとずれの大きさは急激に増大する。ただし、このずれが急激に増大しはじめる限界のピーク間隔の大きさは、ピーク面積が大きくなるにしたがって、すなわち2つのピークの間隔の差が大きい程、大きくなる傾向を示すことがわかる。ピーク面積の異なる2つのピークからなるスペクトルの解析では、面積の大きいピークの方が面積の小さいピークよりも面積の相対誤差は小さい。解析結果を調べてみると、 σ , ℓ , ϵ を固定パラメータとした解析のピーク面積の相対誤差は、 ℓ と ϵ だけを固定パラメータとし、 σ を自由パラメータにした場合に比較して1/10以下である。

Fig. 3.7, Fig. 3.8, Fig. 3.9はそれぞれ前述の合成スペクトルGS22, GS24, GS41を解析して得たピーク中心位置の標準値に対するずれの大きさをピーク間隔の関数として示したものである。これらの図から明らかのようにピーク中心位置のずれの大きさは、 σ , ℓ , ϵ を固定パラメータとして解析した方が、 ℓ , ϵ だけを固定し σ を自由パラメータとするよりも数倍小さい。またピーク間隔がFWHMの0.75倍以上ある場合、ピーク位置のずれはFWHMの1/20以下であるが、ピーク間隔がFWHMの0.5倍以下の場合ずれの大きさは急激に大きくなることが指摘される。

以上の結果をまとめて、次の様に言うことができる。

- 1) 本コードで用いているスペクトル表示関数を使用する場合、スペクトルを解析して有意な解析結果を得るためには2ピーク間隔がFWHM程度は必要である。ピーク間隔がFWHMの0.5倍以下の2ピーク複合スペクトルを解析することは無意味である。
- 2) 形状パラメータ σ , ℓ , ϵ がpeak shape calibrationにより正確に評価されるならば、 σ , ℓ , ϵ を固定パラメータとした解析の方が、 ℓ , ϵ だけを固定パラメータとした解析よりも数倍以上精度が改善される。すなわちFPによるガンマ線スペクトルのように多数のガンマ線ピークが隣接しているスペクトルを精度良く解析しようとする場合、 σ , ℓ , ϵ といった形状パラメータをpeak shape calibrationで得られた値に固定することが必要である。

3.2 FWHMあたりのチャンネル数の、ガンマ線ピーク解析結果におよぼす影響

ピークのFWHMに含まれるチャンネル数が解析結果におよぼす影響を調べるため、 ^{137}Cs から放出される661.6 keVのガンマ線を使って検討を行なった。スペクトルの解析はすべてのパラメータを自由パラメータとして行なった。Table 3.1には

- 1) 解析にともなうピーク面積の相対誤差
- 2) ピーク面積の標準値に対するばらつき

が示されている。ここで標準値としてFWHMあたりのチャンネル数が、解析の対象としているスペクトルの中で最大のスペクトル(FWHM=29.73チャンネル)のピーク面積が用いられている。FWHMあたりのチャンネル数が2チャンネル以下ではパラメータをすべて自由パラメータとして解析することは不可能であるが、FWHMが3チャンネル以上あれば標準値に対するばらつきをほぼ1%以下におさえることができる。またFWHMが20チャンネル以上であれば標準値に対するばらつきは無視することができる。ここではすべてのパラメータを自由パラメータとして解析を行なっているため、形状パラメー

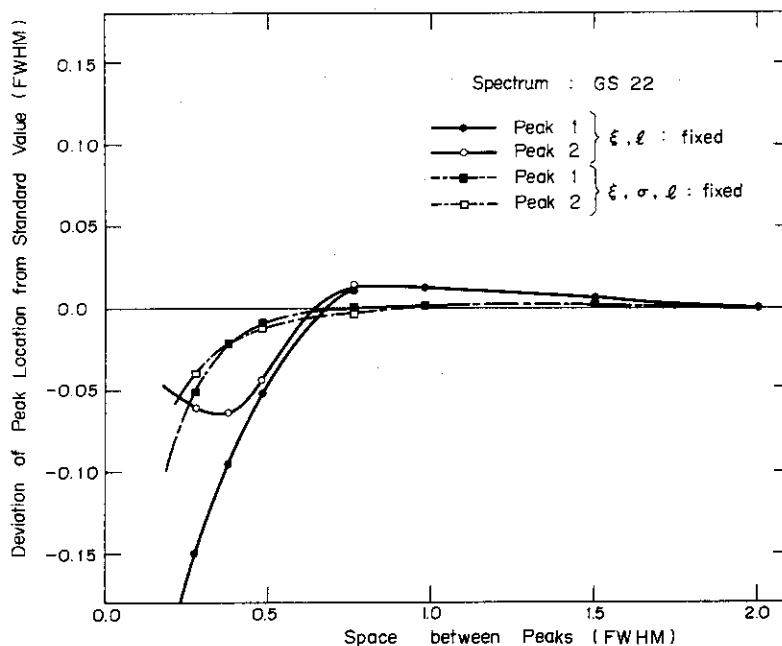


Fig. 3.7 合成スペクトルのフィッティングによるピーク中心位置の標準値に対するズレと、スペクトル中の2ピークの間隔との関係。Peak1とPeak2はそれぞれ低エネルギー側ピークと高エネルギー側ピークであり、その面積比は2:2である。

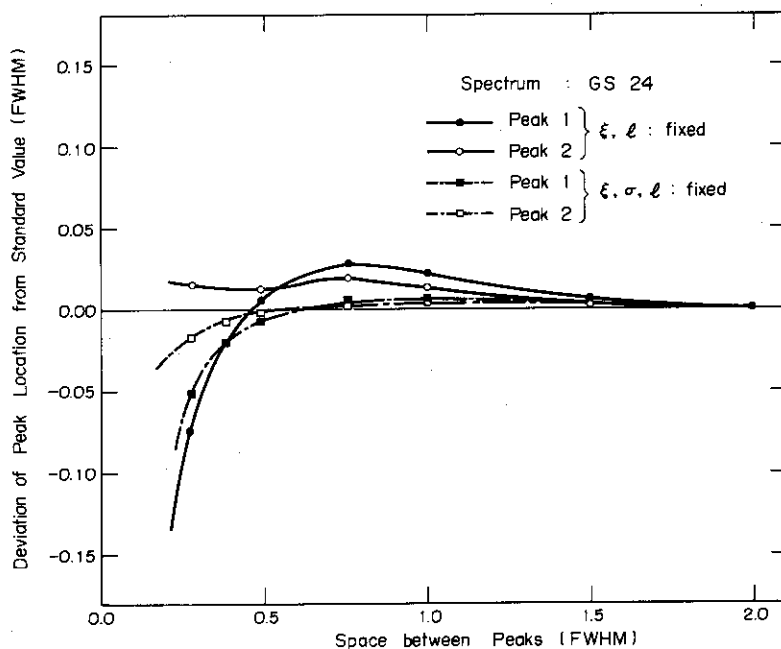


Fig. 3.8 合成スペクトルのフィッティングによるピーク中心位置の標準値に対するズレと、スペクトル中の2ピークの間隔との関係。Peak1とPeak2はそれぞれ低エネルギー側ピークと高エネルギー側ピークであり、その面積比は2:4である。

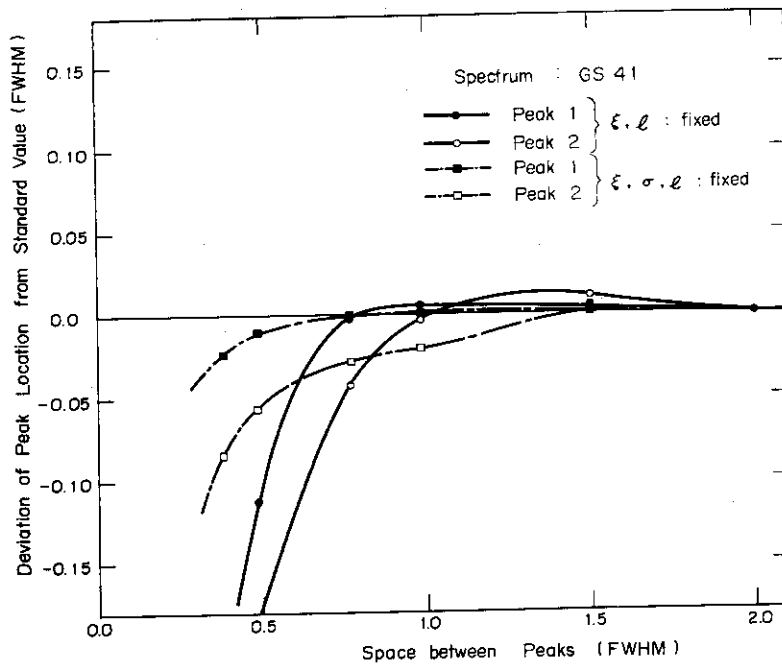


Fig. 3.9 合成スペクトルのフィッティングによるピーク中心位置の標準値に対するズレと、スペクトル中の2ピークの間隔との関係。Peak1とPeak2はそれぞれ低エネルギー側ピークと高エネルギー側ピークであり、その面積比は4:1である。

Table 3.1 FWHMあたりのチャンネル数に対するピーク面積の相対誤差および標準値に対する各ピーク面積のバラツキ。ただしFWHMが1.34チャンネルのスペクトルは解が得られなかった。

FWHM(ch)	計数時間	ピーク面積	面積誤差 (%)	バラツキ (%)
1.34	1 ks			
3.31	1 ks	1.1519×10^5	14.40	0.37
3.64	1 ks	1.1474×10^5	11.57	0.02
4.96	2 ks	2.2688×10^5	5.17	-1.15
6.14	2 ks	2.2988×10^5	4.07	0.16
10.54	2 ks	2.2744×10^5	5.07	-0.91
14.92	2 ks	2.2852×10^5	4.08	-0.44
22.42	4 ks	4.5901×10^5	2.84	-0.01
29.73	4 ks	4.5905×10^5 *)	2.04	0.00

*) ピーク面積の標準値

を固定した場合の解析にくらべてピーク面積の相対誤差は大きくなり、FWHMあたり5チャンネル以下のピーク面積の相対誤差は、面積が 10^5 カウントを越えるピークでも10%以上に達する。FWHMが5チャンネル以下のピークの解析では、すべてのパラメータを自由パラメータとすると相対誤差が大きくなるため形状パラメータを一定値に固定することを考えなければならない。またFWHMが3チャンネル以下では相対誤差が急激に増加することが示されるので、解析の対象となるピークのFWHMは少なくとも3チャンネル以上となるようにスペクトルを測定することが必要である。

4. Taからのガンマ線スペクトルの解析

$^{184}\text{W}(\gamma, p)^{183}\text{Ta}$, $^{184}\text{W}(\gamma, np)^{182}\text{Ta}$ の反応で得られる ^{183}Ta , ^{182}Ta から放出されるガンマ線のスペクトル解析を行なった。なおこのスペクトルに、 ^{137}Cs (661.6 keV), ^{60}Co (1173.2 keV, 1332.5 keV), ^{88}Y (898.0 keV, 1836.1 keV) のガンマ線を重ね合わせた (Fig. 4.1を参照のこと)。Fig. 4.1からわかるようにスペクトル中には同一フィッティング領域に最大4本のガンマ線ピークからなる複合ピークも数多く見出され、本コードの機能をチェックするテストスペクトルとしての条件を十分満足していると言える。スペクトルのエネルギー範囲は0 MeV から 2 MeV であり、チャンネル幅は約 0.28 keV/ch である。

4.1 Peak shape calibration の評価

ガンマ線スペクトルのフィッティングを行う前にまず peak shape calibration を行なう。calibration に用いたガンマ線源は、 ^{203}Hg (279.2 keV), ^{113}Sn (393.0 keV), ^{137}Cs (661.6 keV), ^{54}Mn (834.6 keV), ^{88}Y (1836.1 keV) の5種類である。calibration の結果決定された多項式の係数の値および解析にともなうそれらの誤差を Table 4.1 に示す。

Table 4.1 ^{203}Hg , ^{113}Sn , ^{137}Cs , ^{54}Mn , ^{88}Y からの γ 線を用いて求めた、ガンマ線ピークの形状パラメータのエネルギー依存性を表現する多項式の各係数。P₅ の場合だけ a が一次項の係数、b が定数項、それ以外は a が二次項の係数、b が一次項の係数、c が定数項を表わす。() 内の値は誤差の評価値である。

	a	b	c
P ₅	$2.80814 \times 10^{-1} (3.050 \times 10^{-4})$	$8.34822 \times 10^1 (6.379 \times 10^{-1})$	
P ₇	$1.34108 \times 10^{-8} (6.581 \times 10^{-9})$	$4.33438 \times 10^{-4} (4.673 \times 10^{-5})$	2.75828 (5.642 × 10 ⁻²)
P ₈	$8.78923 \times 10^{-9} (5.325 \times 10^{-9})$	$-7.92303 \times 10^{-6} (3.891 \times 10^{-5})$	2.39523 (4.890 × 10 ⁻²)
ε	$5.81907 \times 10^{-11} (2.037 \times 10^{-10})$	$-1.37286 \times 10^{-6} (1.522 \times 10^{-6})$	$1.70387 \times 10^{-2} (1.963 \times 10^{-3})$

また Fig. 4.2 には P₅(x), σ(x), ℓ(x), ε(x) が x 座標にチャンネル数をとって図示されている。P₅(x) は一次式で十分に表現でき、σ(x), ℓ(x), ε(x) (≡ P₄(x)/P₅(x)) についてはすべて下に凸の二次曲線で表現されるが、これら3つのパラメータのどれについても二次の項の係数が非常に小さくほとんど直線に近い二次曲線である。この peak shape calibration で得られた形状パラメータの精度がスペクトルの解析精度に直接ある

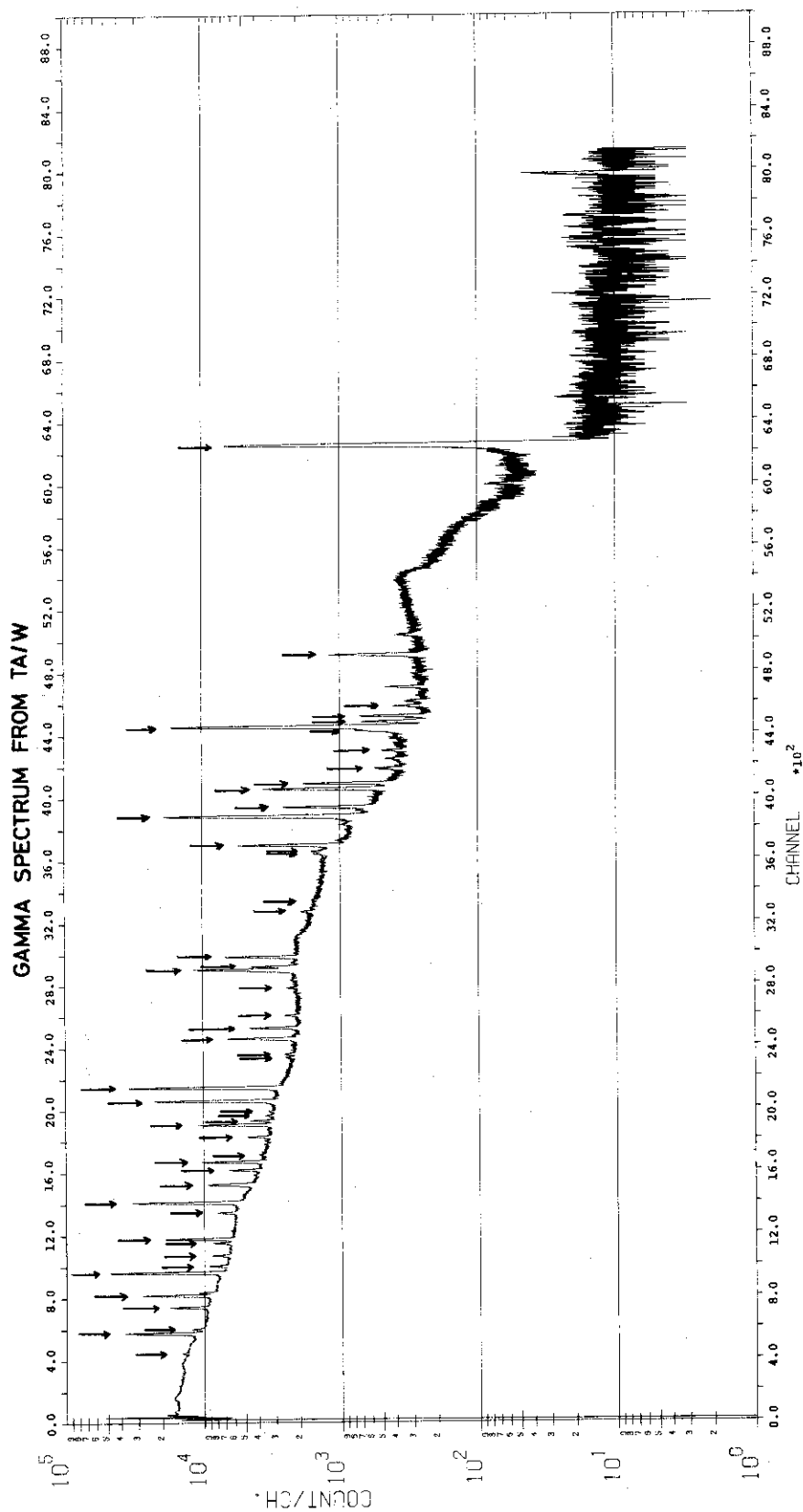


Fig. 4.1 Ta のガンマスペクトルに数種類の標準線源のガンマ線を加えて得たテスト用の標準スペクトル。図中の矢印は、ピークサーチによってピークと認定された

Fig. 4.1 Ta のガンマスペクトルに数種類の標準線源のガンマ線を加えて得たテスト用の標準スペクトル。図中の矢印は、ピークサーチによってピークと認定された位置を示す。

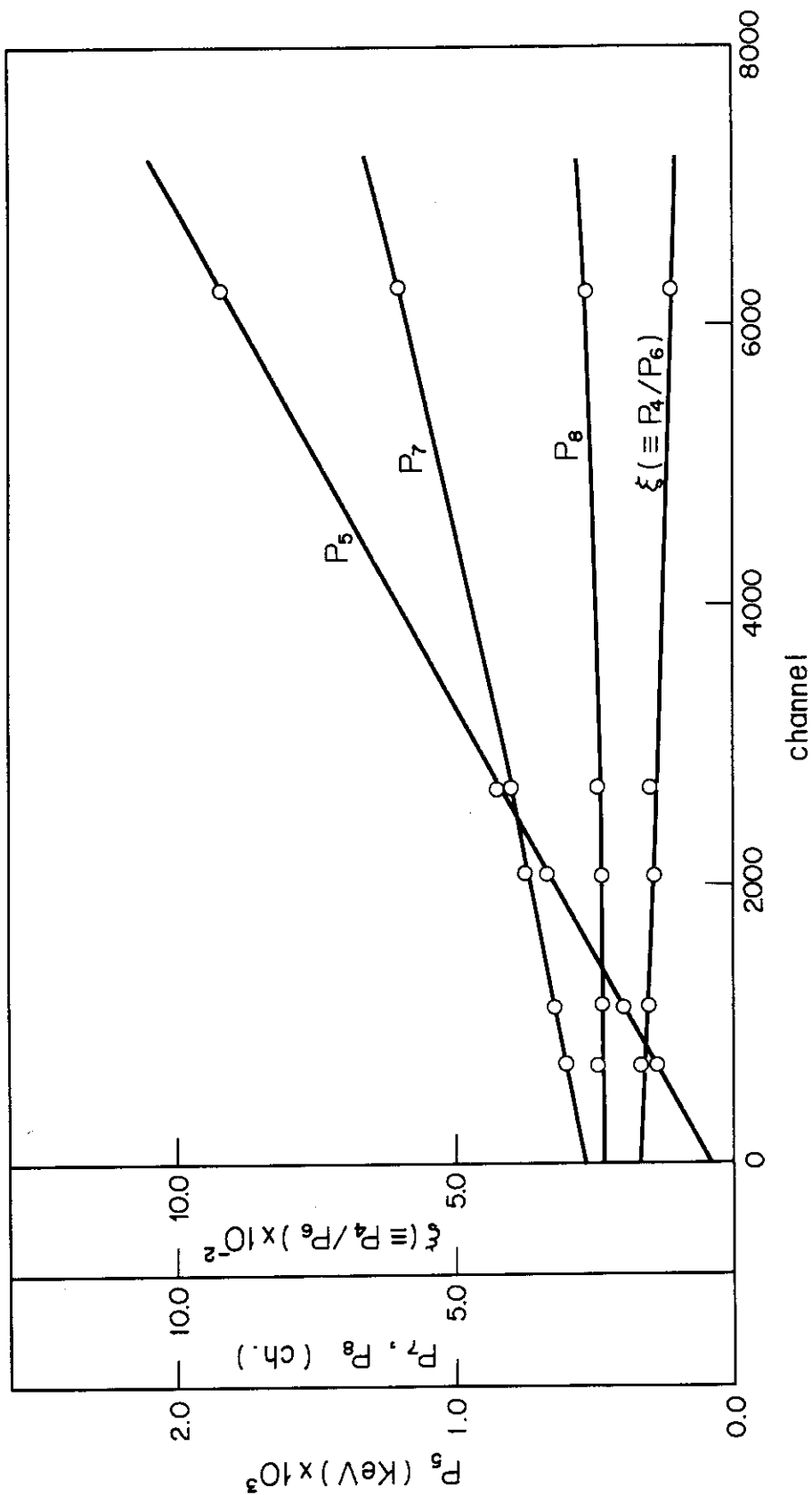


Fig. 4.2 Peak Shape Calibration により求められた形状パラメータのエネルギー依存性。○印は各々の単一ピークのフィッティングにより得られた形状パラメータを表わし、実線は形状パラメータのエネルギー依存性に対する関数表示である。

いは間接的に影響してくるので calibration に用いる単一ピークスペクトルは、パイルアップがおこらないような計数率で、しかもピーク面積が大きくなるように十分に計数時間をかけて測定することが必要である。

4.2 スペクトル表示関数形の検討

Ta ガンマ線スペクトル (Fig. 4.1 を参照) のなかから約 552 keV のエネルギーを持つ単一ピークだけを取り出してフィッティングした結果を Fig. 4.3 に示す。同図には実験値、計算値 (フィッティング結果)、ガウス関数近似、VCF (Valley Count Function) およびピークに含まれるテイリング成分が示されている。ここでテイリング成分は計算値と純粋なガウス関数の差として評価されるものである。同図から明らかなようにガンマ線ピークはガウス関数およびそれと滑らかに接続する指数関数で十分に表現できることがわかる。すなわちピークの高エネルギー側はガウス関数だけで十分に表現でき、低エネルギー側のテイリング部分は指数関数でうまく表現することができる。さらに同図に示されているテイリング部分の面積はピーク全体の面積に比較して決して無視できない大きさであり、このことからガンマ線ピークは単にガウス関数だけで表現するのは不十分であることが明確に示される。

4.3 ピークサーチ機能の検討

スペクトルのピークサーチに入る前に A. Savitzky の方法⁶⁾により実験値の平滑化および一次微分を行なっておく必要がある。一例として、4920チャンネル近傍の単一ガンマ線ピークについての平滑化データと一次微係数を Fig. 4.4 に示した。

平滑化データおよびその一次微係数を用いて行なったピークサーチの結果検出した Ta のガンマ線スペクトルに含まれるガンマ線ピークの総数は 50 個であり、それらのピークが 38 のフィッティング領域に区分された。それらのうちで 1 個のピークを含む領域は 29 個、2 ピークを含む領域は 7 個、3 ピーク、4 ピークを含む領域はそれぞれ 1 個である。ただしピークサーチの段階でピークの最高値が 100 カウント以下のピークについてはこれをピークと認定しなかった。検出された 50 個のピーク概略の位置を Fig. 4.1 のスペクトルの中に矢印で示した。

4.4 隠れたピークの検出機能の検討

ピークサーチの段階で検出できなかった複合ピークに含まれるいわゆる隠れたピークが、フィッティング結果を検定した結果新たに検出された例を次に示す。Fig. 4.5 には Ta スペクトルのうちの 2900チャンネル近傍の複合ピークが示されているが、この部分の複合ピークに対してピークサーチを行なると図中の B と C の印をつけた部分しかピークを検出できず、A の部分の隠れたピークは見落されてしまう。この場合本コードにおいてはこの領域のフィッティングは 2 ピークを仮定して行なわざるを得ない。その場合の解析結果および実験値と計算値との残差が同じく Fig. 4.5 に示されている。この図から明らかなように残差にはある一定の傾向が出現している。また残差の絶対値が (2-32) 式の不等式を満足している。したがってこの領域のスペクトルに対しては、2 ピークを仮定した解析では不十分であることがわかる。

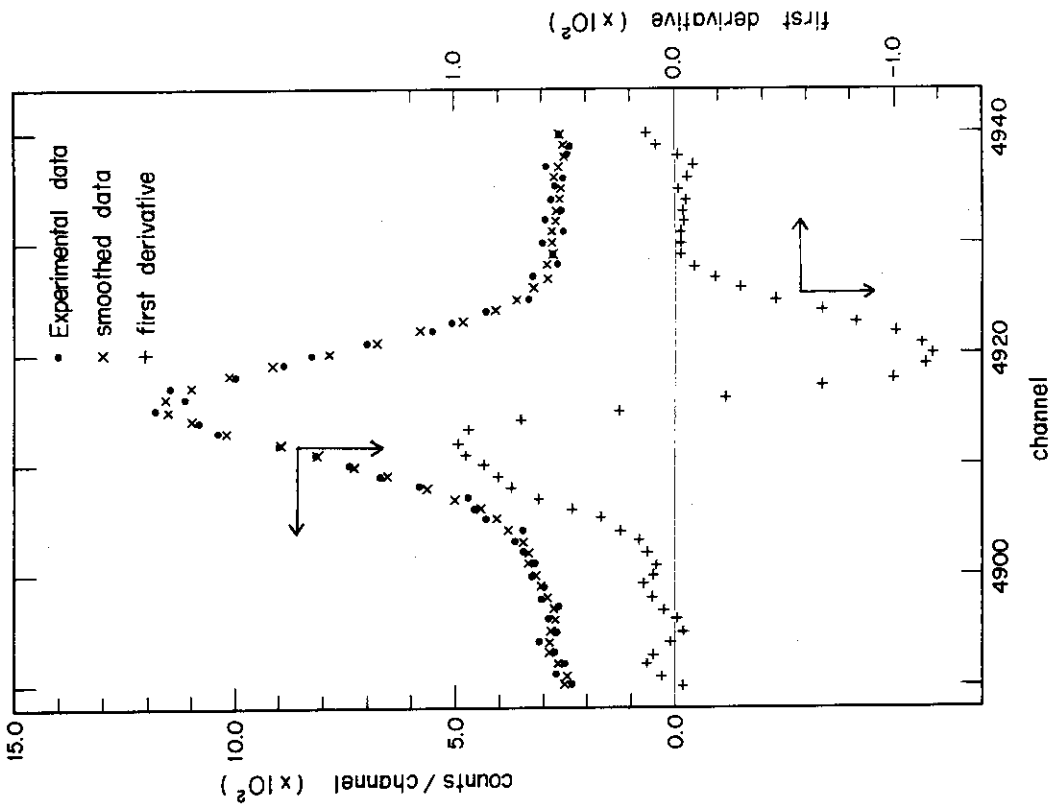


Fig. 4.4 ガンマ線ピークの測定値および Savitzky の方法⁴⁾を用いて計算した平滑化データと一次微係数。

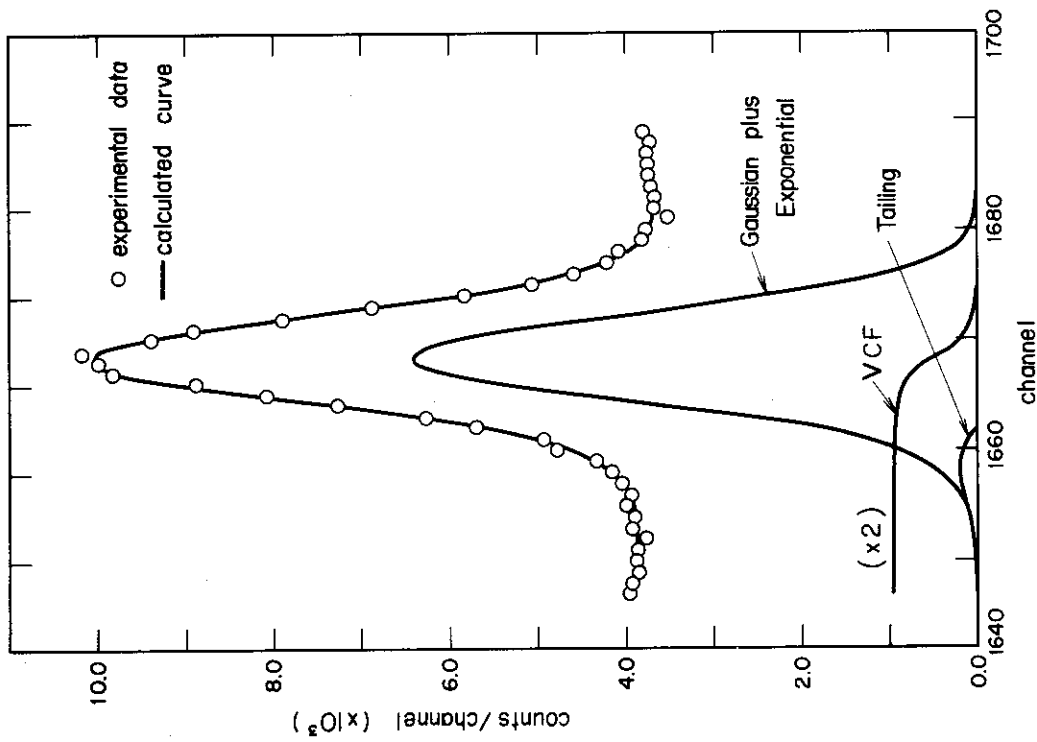


Fig. 4.3 単一ガンマ線ピークの解析結果。このピークは T'a スペクトルに含まれる, 552keV のガンマ線によるものである。ただし同図には 2 次式で表わされるバックグラウンド成分は示されていない。

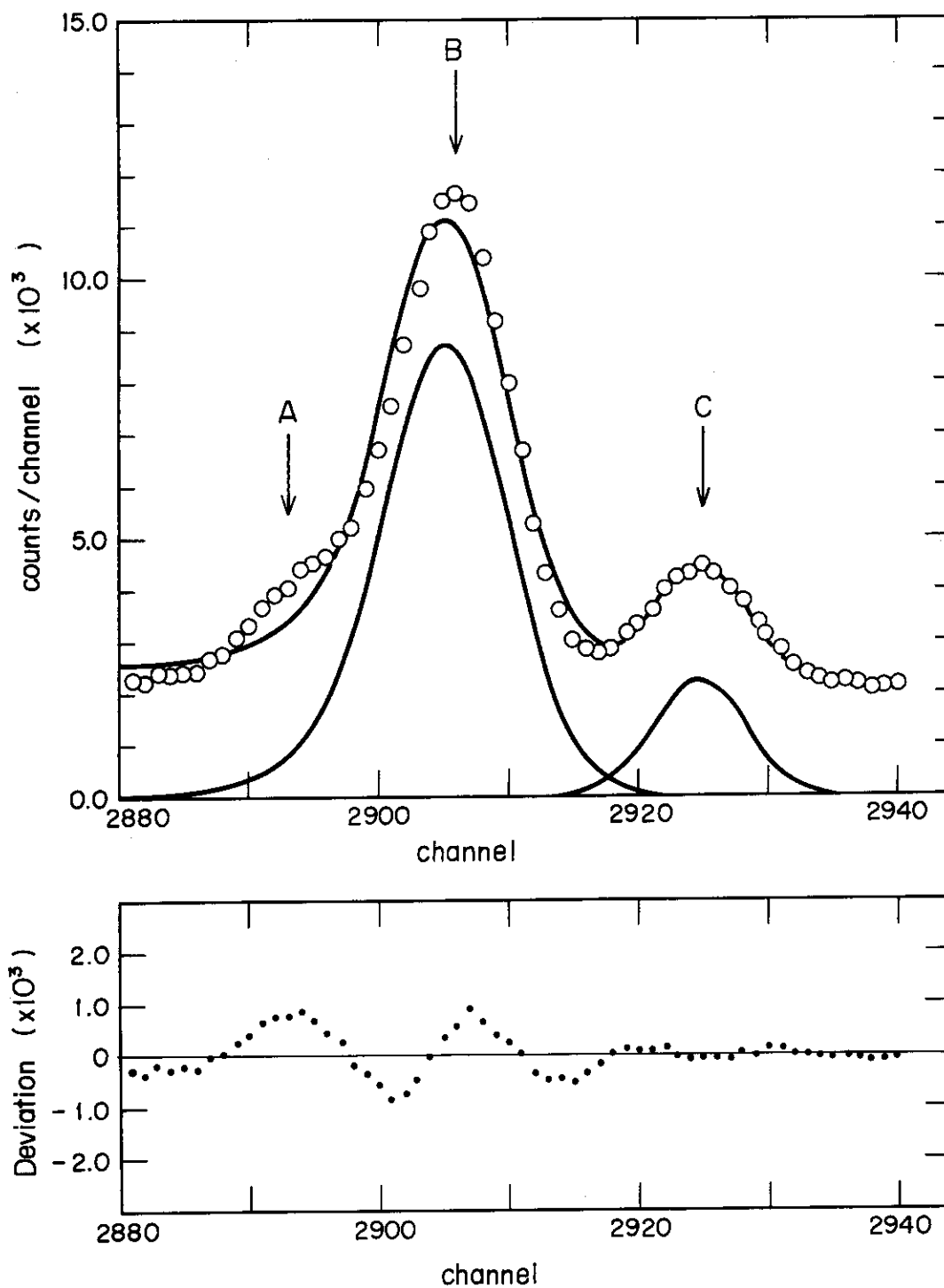


Fig.4.5 Ta スペクトルの 2900チャンネル近傍の、2ピークを仮定したフィッティングによる解析結果およびその場合の測定値と計算値の残差。ただし同図では 2 次式で表わされるバックグラウンドは示されていない。

そこでこの領域にもう一つピークを追加し、3ピークの仮定でフィッティングをやりなおす。この時、3つのピークの中心位置の初期推定値はそれぞれ2892チャンネル、2906チャンネル、2925チャンネルにコード内で自動的に設定された。この3ピーク仮定のフィッティングによる解析結果をFig. 4.6に示す。この場合の残差はゼロを中心としてランダムなばらつきを示しており、しかもいかなるチャンネルの残差の絶対値も標準偏差の5倍を越えないことが確認された。このことからFig. 4.5に示されるスペクトルは2つのピークからなる複合ピークではなく3つのピークから成り立っていることが示された。同様に5800チャンネル近傍でも隠れたピークが検出できたため、Taスペクトルに含まれるピーク数は全部で52個となった。

4.5 Ta スペクトルの解析結果およびその検討

本コードで利用した非線型最小二乗法を有効に使用するためにはフィッティングパラメータの初期推定値をできるだけ真の値に近い値に設定することが必要である。単一ピークを解析する場合には初期推定値が真の値から多少ずれていても最終結果にたいして大きな影響を与えない。しかし多数のピークからなる複合ピークを解析する場合、初期推定値が不正確であると解が収束しにくくなったり、あるいは発散する可能性がでてくる。したがって複合ピークの解析の場合、特に初期推定値の正確さが要求される。本コードを用いて行なったTaスペクトルの解析結果を調べると、ピークサーチの段階で決定されるピーク中心位置の推定値の最終値との差はすべて0.1%以下であり、非常に正確な推定値が与えられていることがわかる。またガウス関数の高さの推定値は最終値に対して特にピーク値とバックグラウンドの比が小さく(0.2以下)、かつピーク値が非常に小さい(～100カウント)ピークについては±30%～±70%のばらつきが存在するが、それ以外のピークについてはほぼ±10%の範囲内で評価することができる。

本解析では、peak shape calibration でそのエネルギー依存性が決定されているパラメータのうち、 ϵ および ℓ についてはその値を calibration の結果から決められる値に固定し、ピーク中心位置および σ を自由パラメータとしてフィッティングを行なった。第3章で行なった最小二乗法の精度の検討の結論にしたがうと、もし σ の値が peak shape calibration により正しく与えられるならば σ を固定パラメータとして解析を行なった方が解析精度は良い。それにもかかわらず本解析において σ を自由パラメータとして取扱った理由は、Fig. 4.7 から明らかなようにピーク毎に求められた解析結果の σ の値と peak shape calibration で決定された σ との間には 0.8 MeV 以下の領域において系統的な差が生じていることによる。その原因は明らかでないが現状のままで σ を ϵ 、 ℓ と同様に固定パラメータとして解析を行なったとすると、 σ を不正確な値に強制的に固定して解析を行なうことになり、計算結果のピーク形状はゆがめられ σ を自由パラメータとした場合の解析結果に比較して variance が増大し解析精度はむしろ悪化してしまふ。

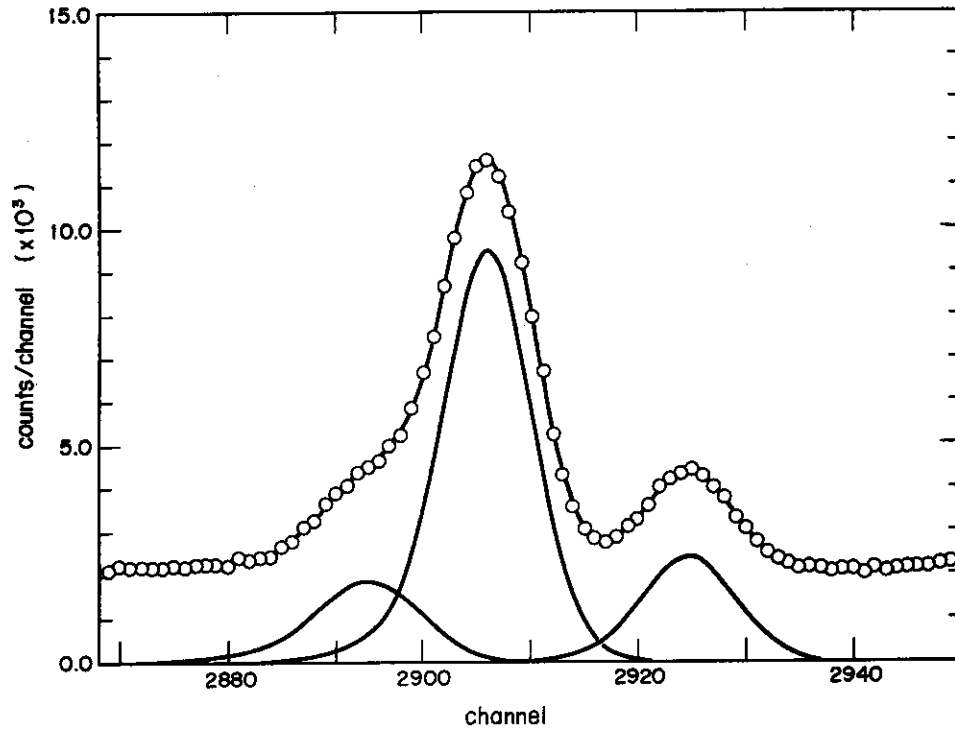


Fig.4.6 Ta スペクトルの 2900チャンネル近傍の、3ピークを仮定したフィッティングによる解析結果。ただし同図では2次式で表わされるバックグラウンドは示されていない。

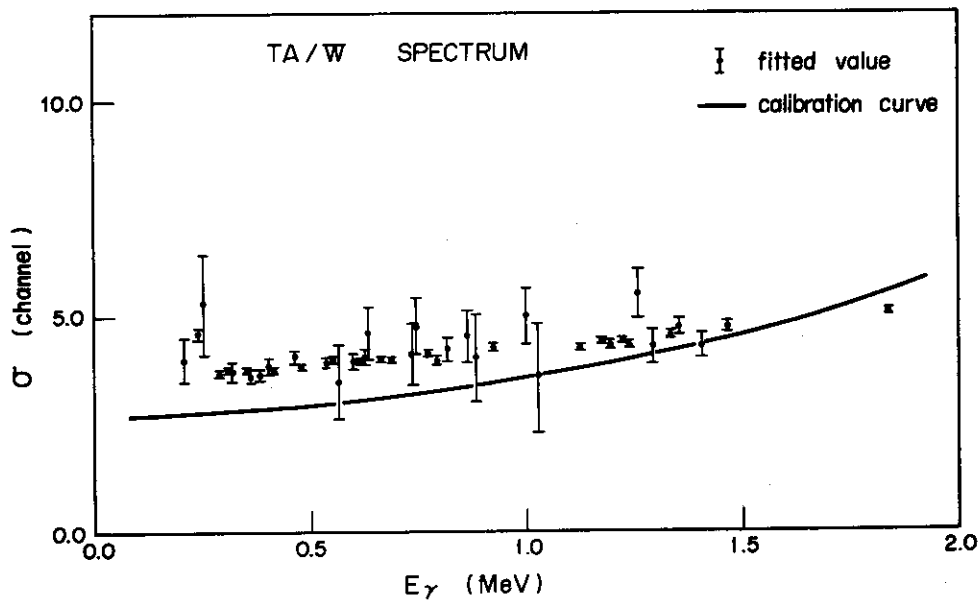


Fig.4.7 ガンマ線ピーク毎に得られたガウス関数の標準偏差およびPeak shape calibrationで得られた標準偏差の calibration curve.

5. む す び

本コードは、Ge(Li)検出器を用いて得られるガンマ線スペクトルの解析を目的として、1)スペクトル中のガンマ線ピークの検出、2)ピーク毎のピーク中心チャンネル(ガンマ線エネルギー)および3)ピーク面積の評価までを自動的に行なう計算コードである。ガンマ線ピークは低エネルギー側のテイリング部分を表現する指数関数とそれに滑らかに接続するガウス関数およびコンプトンエッジとピークとの間の谷間の部分を表現するValley Count Function (VCF)とで表現する。本コードではスペクトルフィッティングの前段階としてpeak shape calibrationの過程を導入し、そこでピーク形状を表わすパラメータのエネルギー依存性を多項式で表現する。それらのパラメータのうちピーク中心からテイリング部分までの距離の平方根 ℓ 、VCFとガウス関数の高さの比 ϵ を固定パラメータ、ピークのFWHMに比例した量 σ を自由パラメータとしてスペクトルの解析を行なっている。したがって解析の結果ピーク毎にその値が決定されるパラメータは1) σ 、2)ガウス関数の高さおよび3)ピーク中心位置である。またピークサーチは表示関数から求めた微分値と実験値から求めた微分値の相互比較により行なり。このピークサーチの方法では複合ピークの多重度の判定は不可能であるため、本コードでは、実験値と計算値との残差の傾向を調べ、それがランダムなばらつきを示しているかどうかの判定をくり返して複合ピークの中に隠されたピークを検出する機能をそなえている。

本コードに必要なコアメモリは約110K語、8192チャンネルまでのスペクトルの解析が可能であり、同時にフィッティングできるピーク数は最大10ピークまでである。計算時間(cpu)は、本稿で行なったTeスペクトルの解析を例にとると、FACOM 230-60を使って52個のピークを含む8000チャンネルのスペクトルを38個のフィッティング領域に区分して解析を行なった場合約300秒である。

隣り合う2つのピークを複合ピークとみなして同時に解析する場合、ピーク間隔がFWHMの0.5倍以下では有意な解析結果が得られないかまたは解析が不可能となる。また2つのピークの面積の差が大きくなるにしたがって解析可能な限界のピーク間隔は大きくなる傾向にある。したがって解析の対象となる複合ピークにおけるピーク間隔はFWHM以上あることがのぞましい。形状パラメータ σ 、 ℓ 、 ϵ は、もし正確な値がpeak shape calibrationによって与えられるならば、それらのパラメータを固定パラメータとして解析した方が、自由パラメータとして取扱かうよりも解析精度は向上する。また本コードで用いている表示関数を使って有意な解析結果たるためには、解析の対象となるピークのFWHMあたりのチャンネル数は最低3チャンネルは必要である。したがって3チャンネル以下のスペクトルを解析しようとするれば他の解析方法、たとえば田坂による標準スペクトル法⁸⁾などに頼らざるを得ない。また本コードを使って行なったTeスペクトルのテスト計算の結果からピーク毎に得られたFWHMとpeak shape calibrationの結果から求められたFWHMとの間に系統的なずれが存在することが示された。この傾向は特にスペクトルの低エネルギー領域において顕著である。このずれの原因は現在のところ不明であるが、この系統的なずれが存在するため本解析では3種類の形状パラメータのうち σ だけは自由パラメータとして取扱かわざるを得なかった。このFW

HMの系統的なずれの取扱い方は今後の課題であろう。

これまでの検討結果から、多少の制約はあるものの、本コードは多重ピークを含むスペクトルの解析に十分使用しうるものであることが結論づけられる。

謝 辞

本解析の遂行にあたって適切な御教示をいただき、また本コードの解析精度検討のために合成スペクトルを使用させていただいた高速炉設計班の田坂完二氏に深く感謝いたします。さらに本稿のまとめにあたって助言をいただいた遮蔽研究室の宮坂室長に謝意を表します。

HMの系統的なずれの取扱い方は今後の課題であろう。

これまでの検討結果から、多少の制約はあるものの、本コードは多重ピークを含むスペクトルの解析に十分使用しうるものであることが結論づけられる。

謝 辞

本解析の遂行にあたって適切な御教示をいただき、また本コードの解析精度検討のために合成スペクトルを使用させていただいた高速炉設計班の田坂完二氏に深く感謝いたします。さらに本稿のまとめにあたって助言をいただいた遮蔽研究室の宮坂室長に謝意を表します。

References

- 1) I.A.Slavić and S.P.Bingulac, "A Simple Method for Full Automatic Gamma-Ray Spectra Analysis," IBK-942 (1970)
- 2) G.D.Seybold, "GSSLRN-I An Automated Least Squares Computer Code for the Analysis of Photopeak Spectra," BNWL-1227 (1969)
- 3) J.T.Routti and S.G.Prussin, "Photopeak Method for the Computer Analysis of Gamma-Ray Spectra from Semiconductor Detectors," Nucl. Instr. and Meth. 72 (1969)
- 4) D.C.Robinson, "A Computer Program for the Determination of Accurate Gamma Ray Line Intensities from Germanium Spectra," AERE-R 6144 (1969)
- 5) M.Putnam et al, "A Nonlinear Least-square Program for the Determination of Parameters of Photopeaks by the Use of a Modified-Gaussian Function," IDO-17016 (1965)
- 6) A.Savitzky and M.J.E.Golay, "Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures," Anal. Chem. 36 (1964), pp.1627 -1639.
- 7) H.P.Yule, "Mathematical Smoothing of Gamma Ray Spectra," Nucl. Instr. and Meth. 54 (1967)
- 8) K.Tasaka, "Standard Spectrum Method fo the Analysis of Gamma-Ray Spectra from Semiconductor Detectors," Nucl. Instr. and Meth. 109 (1973).

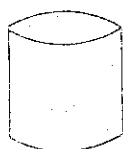
APPENDIX A コードの流れ図

この流れ図はコード全体の流れを簡潔に示してあるとともに、必要なインプットデータの読み込みが細大もらさず記入されており、ユーザはこの流れ図を参照することにより過不足なく正確にインプットデータを与えることができる。ただしここではインプットとして必要な変数名だけが示されており、変数の意味およびその読み込み様式の説明はAPPENDIX B 入力形式の項で行なわれる。

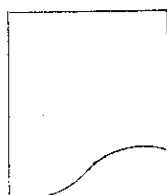
なお、流れ図で使用されている記号の意味は次の通りである。



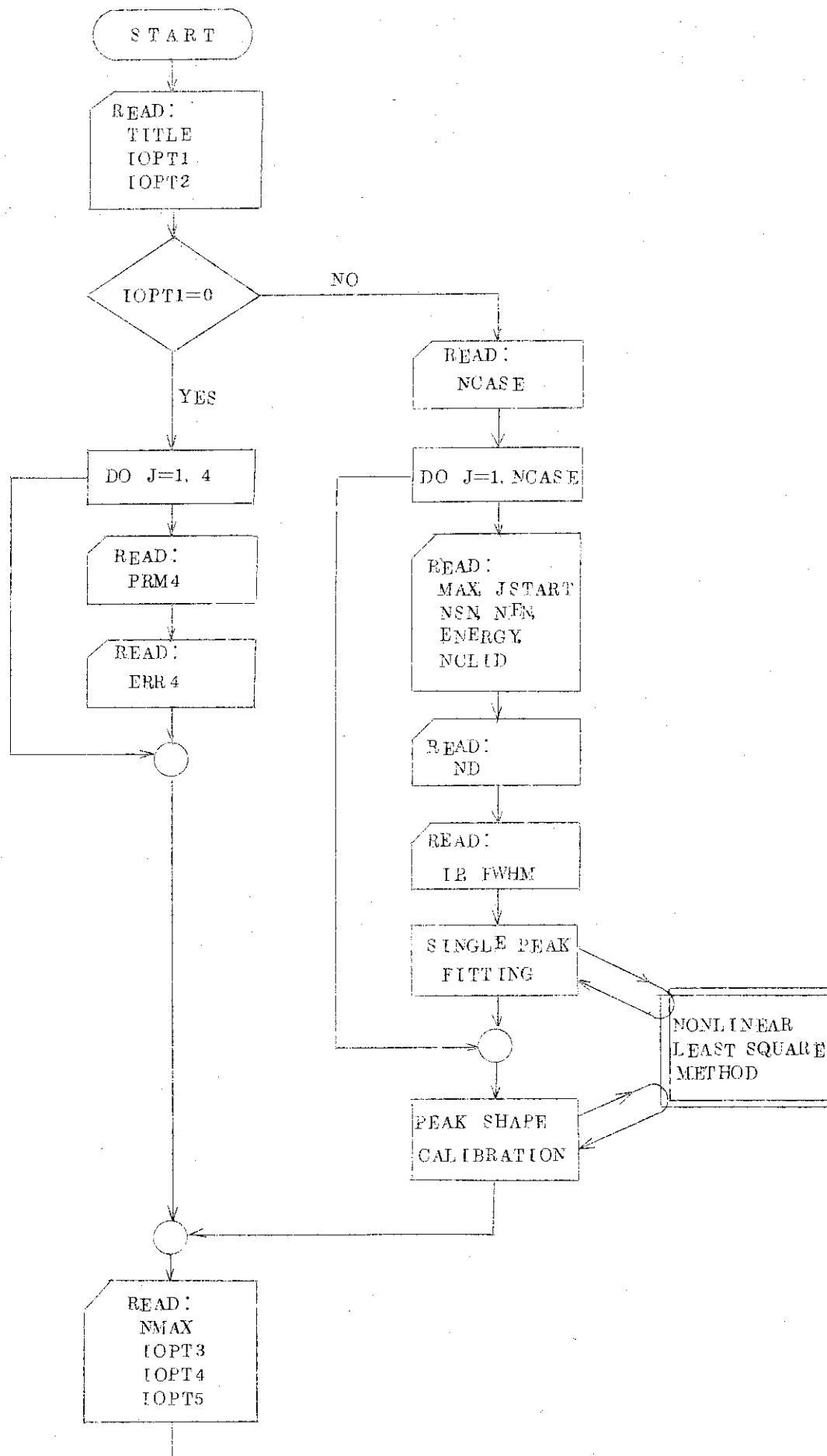
カードによるデータの入力

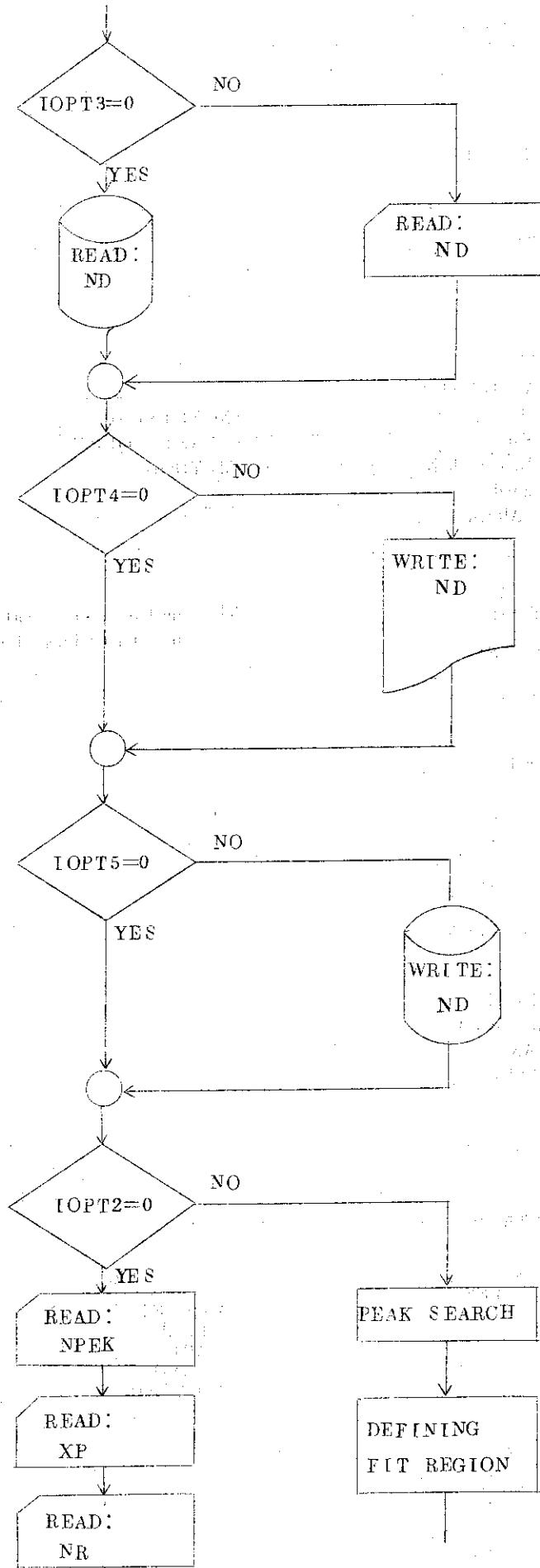


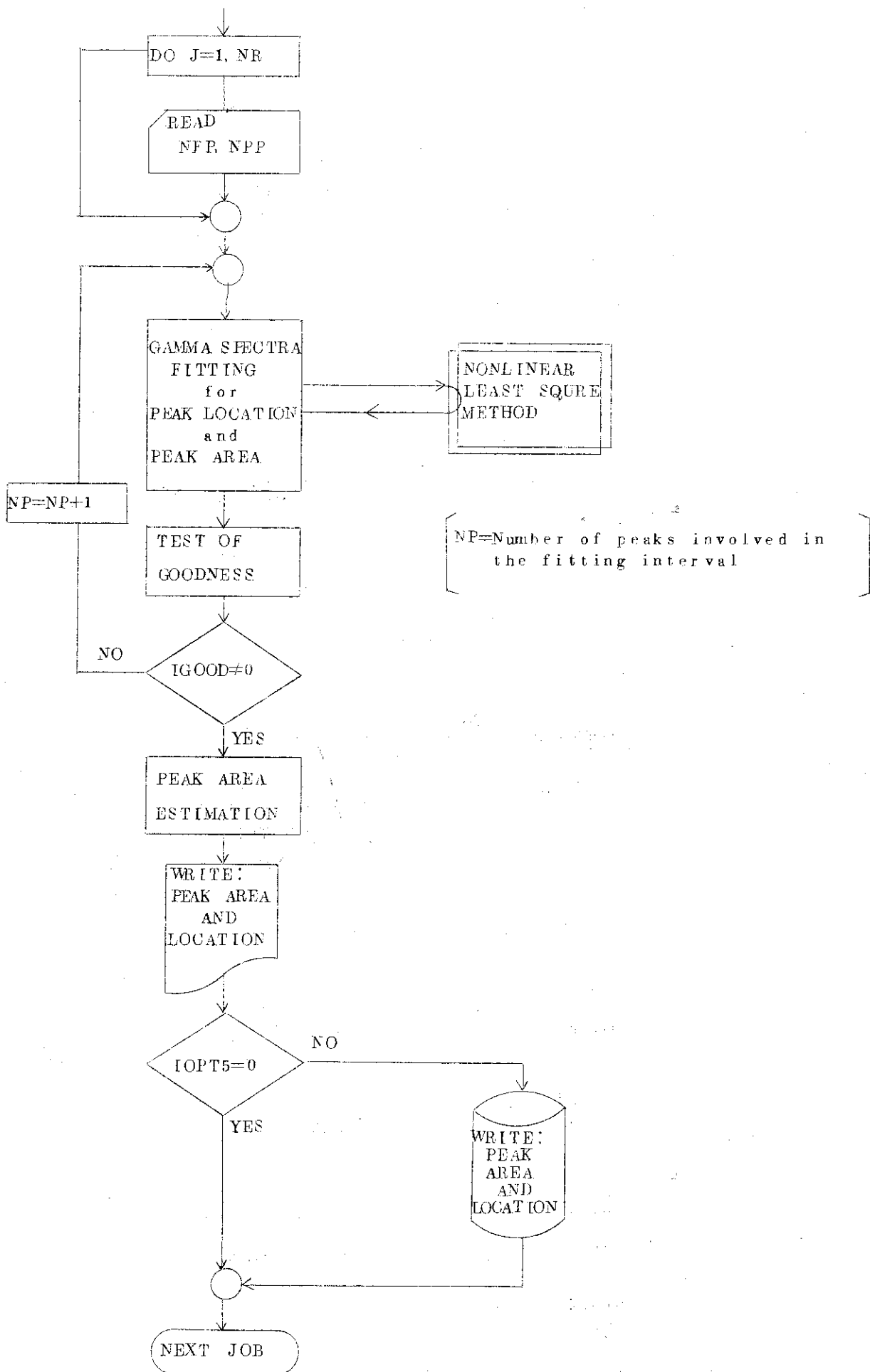
ディスクによるデータの入出力



ラインプリンタによるデータの出力







APPENDIX B 入力形式

#1 (20A4)

TITLE: タイトルカード

#2 (10I6)

IOPT1 = 0 Peak Shape Calibration を行なわない。

≠ 0 Peak Shape Calibration を行なり。

IOPT2 = 0 ピークサーチを行なわない。

≠ 0 ピークサーチを行なり。

#3 (10I6)

NCASE : Peak Shape Calibration に用いる単一ピークの総数

#4 (4I6, F12.5, 2A4) —— IOPT1 ≠ 0 の場合のみ必要

MAX : データ数

JSTART : 読込むデータの最初のチャンネル番号

NSN : フィット領域の最初のチャンネル番号

NEN : フィット領域の最後のチャンネル番号

ENERGY : ガンマ線エネルギー (keV)

NCLID : 核種名

#5 (10I8) —— IOPT1 ≠ 0 の場合のみ必要

ND : 単一ピークのスペクトルデータ

(ND(N), N=1, MAX)

#6 (I6, F12.5) —— IOPT1 ≠ 0 の場合のみ必要

IP : ピーク中心位置の推定値 (NSNを1チャンネルとする)

FWHM : 半値幅の推定値

#4 ~ #6 のデータの読込みは IOPT1 ≠ 0 の時のみ NCASE 回くりかえす。

#7 (3F12.4) —— IOPT1 = 0 の場合のみ必要

PRM4 : peak shape calibration で決定された多項式の係数

(PRM4(I, J), I=1, 3)

引数 J は次に示す多項式の順序を表わしている。

J=1 : $y = a_1 x + b_1$

J=2 : $\sigma(x) = a_2 x^2 + b_2 x + c_2$

J=3 : $\ell(x) = a_3 x^2 + b_3 x + c_3$

J=4 : $\xi(x) = a_4 x^2 + b_4 x + c_4$

#8 (3F12.4) —— IOPT1 = 0 の場合のみ必要

ERR4 : peak shape calibration で決定された多項式係数にともなり絶対誤差 (誤差の入る順序は、#7 に示した多項式のパラメータの並んでいる順序と同じである)

(ERR4(I, J), I=1, 3)

#7, #8 は IOPT = 1 の場合のみ、一対のデータとし 4 回くり返して読込まれる

(J = 1, 4)

7, # 8 で用いられる値は、あらかじめ I O P T 1 ≠ 0 の条件で計算しておかなければならない。したがって最初のケースでは必ず peak shape calibration の option が必要となり、それ以降は、測定条件が変化しない限り、同じ calibration の値を使用することができる。

9 (1 0 I 6)

N M A X : 解析するスペクトルの全データ数

I O P T 3 = 0 スペクトルデータをディスクから読込む (ディスクへの書込み様式は後述)

≠ 0 スペクトルデータをカードから読込む

I O P T 4 = 0 スペクトルデータをプリントしない

≠ 0 スペクトルデータをプリントする

I O P T 5 = 0 スペクトルデータおよび解析結果をディスクに書込まない。

≠ 0 スペクトルデータおよび解析結果をディスク (スクラッチ) に書込む。

1 0 (1 0 I 8) —— I O P T 3 ≠ 0 の場合のみ必要

N D : スペクトルデータ

(N D (I) , I = 1 , N M A X)

1 1 (1 0 I 6) —— I O P T 2 = 0 の場合のみ必要

N P F X : スペクトル中のピーク総数

1 2 (6 F 1 2 . 0) —— I O P T 2 = 0 の場合のみ必要

X P : 各ピークの中心チャンネル推定値 (X P (I) , I = 1 , N P E K)

1 3 (1 0 I 6) —— I O P T 2 = 0 の場合のみ必要

N R : スペクトル中のフィッティング領域の総数

1 4 (1 0 I 6) —— I O P T 2 = 0 の場合のみ必要

N F P : フィッティング領域の最初のピーク指定番号

(指定番号は最初の領域からの通し番号で与えられる)

N P P : フィッティング領域のピークの総数

1 4 は領域数 N R 回だけ順次読込まれる。

9 で I O P T 3 = 0 の場合に必要なデータのディスクへの書込み様式を以下に示す。

WRITE (1) (T I T L (I) , I = 1 , 2 0) , N M A X

WRITE (1) (N D (I) , I = 1 , N M A X)

END FILE 1