

JAERI-M

84-104

小型計算機による  
γ線スペクトル解析コード "GSFIT"

1984年6月

小塚 龍男

JAERI-M レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合わせは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしてください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

JAERI-M reports are issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Section, Division of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, -Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1984

---

編集兼発行 日本原子力研究所  
印刷 日立高速印刷株式会社

小型計算機による $\gamma$ 線スペクトル解析コード"GSFIT"

日本原子力研究所東海研究所原子炉工学部

小 坏 龍 男

(1984年5月15日受理)

本報告書は、FCAのフォイル実験に使用されているGe検出器から得られる $\gamma$ 線スペクトルを自動的に処理するためのコード"GSFIT"の内容および使用方法について記したものである。

このコードは、使用言語にFORTRAN-77を用い小型計算機PDP-11/44(DEC社製)用に開発したものであり最大プログラムメモリーサイズは32Kと制約を受けている。機能として、データ平滑化、一次微係数および二次微係数を用いてのピーク探索および関数フィッティング法によるピーク面積および誤差の算出等を具えている。

関数フィッティング法による $\gamma$ 線スペクトル形状のモデル関数としてピーク部分をガウス関数、またベース部分を一次式として与え、非線形最小自乗法によりパラメーターを求めている。このプログラムの開発によりFCAでは、フォイル実験の測定およびデータの解析を自動的に行うことが可能となり多量のフォイルを用いた詳細な核分裂率分布および捕獲反応率分布の測定が容易になった。

GSFIT : The code for analysis of  $\gamma$ -ray spectrum with  
use of mini-size computers

Tatsuo KOAKUTSU

Department of Reactor Engineering  
Tokai Research Establishment, JAERI

( Received May 15 , 1984 )

For the routine processing of foil counting data measured at FCA using Ge detector, a  $\gamma$ -ray spectrum analyzing code GSFIT have been written in FORTRAN-77 for the mini computer PDP-11/44 ( Digital Equipment Corp.), providing a variety of input and processing options. Maximum memory size of this machine is limited to 32 kilo byte.

The code covers the following functions : data smoothing, peak searching by means of the first and second derivative methods, and the determination of the photo peak area and aberration with use of a functional fitting. Model function of  $\gamma$ -ray spectrum form is assumed to be given by a Gaussian distribution for a peak area and a linear base line for background counts. The counting data are fitted to a functional form with use of a non-linear squares method.

Using the present code which provides a useful tool for processing foil counting data automatically, the measurement of reaction rate distributions could be easily performed in detail with a large number of fission foils.

Keywords ; FCA, GSFIT code,  $\gamma$ -ray spectrum, data smoothing, peak searching, functional fitting, gaussian distribution, non-linear least squares method, reaction rate, fission foils

## 目 次

1. まえがき .....	1
2. 構成および内容 .....	2
2.1 プログラムの全容 .....	2
2.2 プログラムの解説 .....	2
2.2.1 スペクトルの平滑化 .....	2
2.2.2 ピーク探索 .....	3
2.2.3 解析領域の決定 .....	4
2.2.4 関数フィッティング法による計数値の算出 .....	4
3. 使用法 .....	5
3.1 インプット .....	5
3.1.1 定数のインプット .....	6
3.1.2 制御文のインプット .....	7
3.2 アウトプット .....	7
4. 計算例 .....	8
5. 結 語 .....	8
謝 辞 .....	9
文 献 .....	9
Appendix A 非線形最小自乗法 .....	10
Appendix B サブルーチン "GSFIT" リスト .....	19

## Contents

1. Introduction .....	1
2. Description of the Code .....	2
2.1 Computational flow .....	2
2.2 Functions of the code .....	2
2.2.1 Smoothing of spectrum .....	2
2.2.2 Peak searching .....	3
2.2.3 Determination of analysis area .....	4
2.2.4 Calculation of peak area .....	4
3. Instruction .....	5
3.1 Input .....	5
3.2 Output .....	7
4. Sample Calculation .....	8
5. Conclusion .....	8
Acknowledgement .....	9
Reference .....	9
Appendix A. Methods of non-linear least squares .....	10
Appendix B. Source list of subroutine "GSFIT" .....	19

## 1. ま え が き

FCAでは、大型非均質炉心に関する炉物理実験が計画されており、炉心内の詳細な反応率分布を測定することが必要である。

従来よりFCAで行われている計数管法（小型核分裂計数管を用いて行う）では捕獲反応率分布や炉心の任意の位置での測定が不可能である。このため、fission-foilを炉内の任意の位置で照射しGe検出器で $\gamma$ 線を解析し反応率測定を行うことにした。またその必要性から照射するフォイルは多量となり、さらにFP（核分裂生成物）の $\gamma$ 線の測定であるため限られた時間内で測定を終了させなければならない。FCAでは、以上の要請を満足するフォイル測定システムを完成した。これはサンプルチェンジャー（最大150サンプル）、Ge検出器、マルチチャンネルアナライザー（MCA）およびこれらをコントロールすると共にデータを処理する小型コンピュータで構成されている。これによりサンプルチェンジャー上に照射済フォイルをセットすれば、測定および解析は自動的に行われる。

本報告書は、自動測定された $\gamma$ 線スペクトルを解析するために開発したコード“GSFIT”の内容および使用方法について述べる。

ピーク面積を求める方法は、現在チャンネルごとの計数値を加算する計数値積算法と関数フィッティング法の2方法がある。これらについての解析プログラムは、すでにいくつか報告されている<sup>1)~6)</sup>。しかしこれらは、すべて中型計算機以上を必要とし測定とカップル可能な小型計算機を用いたプログラムは、ほとんど報告されていない。計数値積算法は、独立したピークに対しては計算が容易であり信頼性も高いが2個以上のピークが接近あるいは複合したピークに対しては解析が困難である。

本プログラムの主目的は、照射されたfission-foilの特定のFP核種の $\gamma$ 線のピーク面積を解析することを目的としている。この際問題となるのは、着目光電ピーク以外にも他のFPによる影響がベースラインおよびピーク部分に潜んでいると考えられる。前者の計数値積算法で求めたピーク面積においては、ピークおよびベースラインの形状を問わず他のFPによる影響を無視するため、ピーク面積は大きめに評価し、誤差は、計数の統計誤差のみを評価するため過少評価となる。このような問題をさけるため本プログラムにおいては後者の関数フィッティング法を採用した。誤差は、フィッティングに用いたモデル関数と測定値との標準偏差、あるいは計数の統計誤差より考えられる誤差の大きい方を採用した。このプログラムを用いることにより、着目光電ピークの正確なピーク中心チャンネル、FWHM、ピーク面積および誤差等が得られる。

## 2. 構成および内容

### 2.1 プログラムの全容

"GSFIT" は以下に述べるような役割をもった主および副プログラムより構成されている。

#### "MAIN"

スペクトルデータおよび各サブルーチンで使用する定数を読み込み，各副プログラムへの引数の引き渡し，割り付を行う。

#### "SMOOTH"

スペクトルの平滑化を行う。

#### "PEAKSR"

光電ピークを見出す。

#### "ANAREA"

各々の光電ピークに対する解析領域を設定する。

( "PEAKSR" で見出されたピーク )

#### "REANA"

解析するピークのみ解析領域の再吟味，すなわち複合ピーク等は，ここで判断され解析領域が決定する。

#### "GSFIT"

ガウス関数の最小自乗法フィットを行い（非線形解法）ピーク面積，ピークチャンネル，FWHMおよび誤差等の計算を行う。

以上のフローチャートを Fig.1 に示す。

### 2.2 プログラムの解説

#### 2.2.1 スペクトルの平滑化

サブルーチン "SMOOTH" では，測定されたスペクトルの  $i$  チャンネルの計数値を  $n(i)$ ，平滑化されたスペクトルの  $i$  チャンネルの計数値を  $\bar{n}(i)$  とすると

$$\bar{n}(i) = \frac{1}{N_{\text{IORD}}} \cdot \sum_{K=-\text{IORD}}^{\text{IORD}} C_K \cdot n(i+K) \quad \dots \dots \dots (1)$$

$C_K$  : フィルター関数

$N_m$  : 規格化定数

IORD: スムージングポイント数は， $2 * \text{IORD} + 1$  で与えられる。

フィルター関数には，多項式最小自乗フィルタを使用しており Table 1 に数値を示す。



2.2.2 ピーク探索

スペクトルのベースラインは、ある限られたチャンネル領域（半値巾の数倍程度）ではほとんど直線に近いと考えられているので、一次微分あるいは二次微分をすることによって除去される。しかし統計変動の大きいスペクトルをそのまま微分したのでは変動は一層増幅されるため、平滑化を含めた方法が用いられる。本プログラムでは、ピークサーチするデータは平滑化（サブルーチン“SMOOTH”を経た後のデータ）を行ったものを使用している。

サブルーチン“PEAKSR”でのピークの判定では、まずスペクトルの一次微分により正より負となるゼロクロスチャンネルPを見出し、仮のピークとする。その時の二次微分係数  $n''(p)$  および  $\sigma''(p)$  を求める。次に下の条件を満たすものを真のピークとする。

$$(a) \quad |n''(p)| > P2COL * \sigma''(p) \quad \dots\dots\dots (2)$$

ただし、P2COLは、ピーク探索の感度を与える定数（感度係数）で通常2～3の正数としてあらかじめ与えておく。

(b) ピーク中心チャンネルを一次微係数ゼロクロス法により求めている。また求められたピーク中心チャンネルは、後に述べるサブルーチン“GSFIT”での初期値となるものである。一次微係数および二次微係数の求め方を以下に示す。

（一次微係数ゼロクロス法によるピーク中心チャンネルの求め方）

ピークの中心をはさんで隣り合うチャンネルmおよびm+1として、それぞれの計数値に対する一次微係数を  $\Delta n_m$  および  $\Delta n_{m+1}$  とするとピーク中心チャンネルPは、次の式で与えられる。

$$P = m + \frac{\Delta n_m}{\Delta n_m - \Delta n_{m+1}} \quad \dots\dots\dots (3)$$

$\Delta n$ ; 一次微係数

また一次微係数  $\Delta n$  の求め方は、数値フィルターを用いて算出している。iチャンネルの計数値  $n(i)$ 、一次微分をほどこした数値を  $\Delta n_i$  とすると

$$\Delta n_i = \frac{1}{a} \sum_{k=-KP}^{KP} KP * n(i+k) \quad \dots\dots\dots (4)$$

上式においてKおよびaは、ピークの拡がりや対称性に応じて決めることができ、本プログラムでは、K=1, 2, 3を使用でき、値をTable 2に示す。

（二次微分の求め方）

iチャンネルの計数値  $n(i)$ 、二次微分をほどこした数値を  $n''(i)$  とすると

$$n''(i) = \sum_{j=-IP2C}^{IP2C} A_j^2 * n(i+j) \quad \dots\dots\dots (5)$$

$$\sigma(i) = \sqrt{\sum_{j=-IP2C}^{IP2C} A_j^2 * n(i+j)} \quad \dots\dots\dots (6)$$

ここで  $\sum_{j=-IP2C}^{IP2C} = 0$

$A_j$  のフィルター関数として本プログラムでは、ガウス関数二次微分フィルターを使用している。Table 3に示す。

### 2.2.3 解析領域の決定

サブルーチン"ANAREA"では、すべての与えられた解析領域内での各々のピークに対する解析領域を決定する。前項のピークサーチで求めたチャンネルを中心に、低エネルギー側および高エネルギー側のそれぞれの両端 IREA チャンネル内で最低計数値をもつチャンネル  $\ell$  チャンネルおよび  $h$  チャンネルを決定する。ピークサーチで見出されたすべてのピークについて前記操作を行う。次に重複した解析領域を持つピークについては、多重ピークと判定して、多重ピークの中の最低エネルギーを持つピークの  $\ell$  チャンネルおよび最高のエネルギーを持つピークの  $h$  チャンネルを新解析領域と決定する。

次にサブルーチン"REANA"では、サブルーチン"ANAREA"で決定された解析領域内の複合ピークの吟味を行う。すなわち  $\gamma$  線スペクトル測定では特に低エネルギー側にコンプトン効果を含む。次章で述べるサブルーチン"GSFIT"での解析を行う場合（非線形解法）以下のようなピークに対しては発散する可能性があるため解析領域を再度決定し直している。すなわちスペクトル形状関数のモデル関数として"GSFIT"ではピーク部分のガウス関数とベースラインの一次式を与えている。多重ピークの谷間は、少なくとも、一次式の計数よりも大きくななければならない。しかし、前に述べたような効果が生ずると仮想ベースライン以下に計数値（実験値）が存在してしまう。これは、非線形解法を行っている上では、発散する原因となるので、強制的に解析領域を設定し直している。すなわち、Fig.2 に示すような谷間で領域を分けている。解析領域内に2つのピークを持っているとすると解析チャンネルが  $i$  チャンネルで  $\ell \leq i \leq h$  である時新解析領域として (a)  $\ell \leq i \leq h'$  (b)  $h' \leq i \leq h$  の2領域とする。また2つのピークからなる複合ピークを解析する場合、ピーク間隔は半値巾の半分以上必要である。

IREA: インプットファイルより読む。

### 2.2.4 関数フィッティング法による計数値の算出

関数フィッティング法において用いられるスペクトル形状関数には、いろいろの関数形があるが、サブルーチン"GSFIT"ではガウス関数のピーク部分および1次式のベースライン部分を下式のように与えた。

$$f(i, C_j) = C_1 + C_2 (i - \ell) + \sum_n \{ C_{3n} \exp \{ -C_{3n+1} (i - C_{3n+2})^2 \} \} \dots (7)$$

$i$ : チャンネル

$\ell$ : サブルーチン"REANA"で与えられた解析領域下限チャンネル

$n$ : 解析領域内に含まれるピークの数

解法は、最小自乗法により求めた。すなわち(7)式により与えられたスペクトル形状関数には、ピーク中心チャンネル、FWHMなどの（ピーク部分）未知パラメーターが非線形に含まれているため  $C_j$  ( $j=1, 2, \dots$ ) は、初期推定値  $C_j^0$  ( $j=1, 2, \dots$ ) を用いて逐次計算によって真のパラメーターに近ずける方法で求めた。真のパラメーター値  $C_j$  は  $C_j^0$  に近いとして、 $f(i, C_j)$  を  $C_j^0$  のまわりにテイラー展開をし、その一次までの項をとって線形化近似を行う。すなわち

$$Q = \sum_{i=\ell}^n w_i \left[ f(i, C_j^0) - y_i + \sum_j \frac{\partial f(i, C_j^0)}{\partial C_j^0} \cdot \delta C_j \right]^2$$

$y_i$  :  $i$ チャンネルでの計数值

なる $Q$ を最小にする条件 $\partial Q/\partial(\delta C_j) = 0$ なる関係より $j$ の数に等しい正規方程式が得られる。この連立方程式を解いて $\delta C_j$  ( $j=1, 2, \dots$ )を求め $C_j^0 + \delta C_j$ を次のパラメーター $C_j^1$ として与えて再び同じ計算を繰り返す。 $\delta C_j$ が十分小さくなったところでこの計算を終らさせる(収束条件による)。 $w_i$ は重み関数と呼ばれ、 $1/y_i$ あるいは $1$ とすることが多いが本プログラムでは、 $1$ とした。また初期値は前出のサブルーチンより引き渡されている。最後に各ピークに対して、ピーク面積、FWHM、ピーク中心チャンネル、ピークの計数および誤差を以下の式より求めている。

ピーク面積 :  $PA_n$

$$PA_n = 1.772 \times \frac{\sqrt{C_{3n}}}{\sqrt{C_{3n+1}}}$$

誤差 :  $\sigma_{PA_n}$

$$\sigma_{PA_n} = PA_n \times \left[ \frac{V(C_{3n})}{C_{3n}^2} + \frac{V(C_{3n+1})}{4C_{3n+1}^2} \right]^{1/2}$$

$$V(3n, 3n+1) = \frac{F_{jj}^{-1}}{\text{DATA}^{-m}} \cdot \left\{ \sum_{i=l}^h [f(i, C_j) - y_i]^2 \right\}$$

DATA ;  $h-l+1$ 全データ数

$F_{jj}^{-1}$  : 逆マトリックスの対角要素

$$\text{FWHM} = \sqrt{\frac{2.773}{C_{3n+1}}}$$

ピーク中心チャンネル :  $P_C = C_{3n+2}$

ピークチャンネル計数 :  $P_n = C_{3n}$

なお正規方程式中の行列式の解法は、掃き出し法による。Appendix Aにその詳細について述べている。

### 3. 使 用 法

#### 3.1 インプット

2章で述べた種々の定数のインプットは、解析に先立ち以下の形式に従ってファイル上に作成されなければならない。インプットすべき各種の値の意味およびフォーマットは、順を追って以下に示す。

$y_i$  :  $i$ チャンネルでの計数值

なる $Q$ を最小にする条件 $\partial Q/\partial(\delta C_j) = 0$ なる関係より $j$ の数に等しい正規方程式が得られる。この連立方程式を解いて $\delta C_j$  ( $j = 1, 2, \dots$ )を求め $C_j^0 + \delta C_j$ を次のパラメーター $C_j^0$ として与えて再び同じ計算を繰り返す。 $\delta C_j$ が十分小さくなったところでこの計算を終らさせる(収束条件による)。 $w_i$ は重み関数と呼ばれ、 $1/y_i$ あるいは $1$ とすることが多いが本プログラムでは、 $1$ とした。また初期値は前出のサブルーチンより引き渡されている。最後に各ピークに対して、ピーク面積、FWHM、ピーク中心チャンネル、ピークの計数および誤差を以下の式より求めている。

ピーク面積 :  $PA_n$

$$PA_n = 1.772 \times \frac{\sqrt{C_{3n}}}{\sqrt{C_{3n+1}}}$$

誤差 :  $\sigma_{PA_n}$

$$\sigma_{PA_n} = PA_n \times \left[ \frac{V(C_{3n})}{C_{3n}^2} + \frac{V(C_{3n+1})}{4C_{3n+1}^2} \right]^{1/2}$$

$$V(3n, 3n+1) = \frac{F_{jj}^{-1}}{DATA-m} \cdot \left\{ \sum_{i=\ell}^h [f(i, C_j) - y_i]^2 \right\}$$

DATA ;  $h-\ell+1$  全データ数

$F_{jj}^{-1}$  : 逆マトリックスの対角要素

$$FWHM = \sqrt{\frac{2.773}{C_{3n+1}}}$$

ピーク中心チャンネル :  $P_C = C_{3n+2}$

ピークチャンネル計数 :  $P_n = C_{3n}$

なお正規方程式中の行列式の解法は、掃き出し法による。Appendix A にその詳細について述べている。

### 3. 使 用 法

#### 3.1 インプット

2章で述べた種々の定数のインプットは、解析に先立ち以下の形式に従ってファイル上に作成されなければならない。インプットすべき各種の値の意味およびフォーマットは、順を追って以下に示す。

## 3.1.1 定数のインプット

Line 1. (5 I 10)

columns

1 ~ 10	K	not in use
11 ~ 20	IOPT	解析データ (実験値) output option OFF/ON 0/1
21 ~ 30	IST	全体の解析の開始チャンネル 通常 1 channel
31 ~ 40	IEN	終了チャンネル 最大 4000 channel まで
41 ~ 50	ISET	解析ピークの数 0 : 全ピーク解析

Line 2. (4 I 10)

columns

1 ~ 10	ISM	スムージングオプション 0 : スムージング行わない 1 : ガウスフィルター使用 2 : 最小自乗法フィルター 通常 2
11 ~ 20	IORD	スムージングのポイント数は、 $2 * IORD + 1$ で与えられる。 ISM = 0 ; Dummy
21 ~ 30	JOPT	スムージングデータ output option OFF/ON - 0/1
31 ~ 40	IREA	最大解析領域の指定

Line 3. (6 I 10)

1 ~ 10	IP2C	二次微分のポイント数は、 $2 * IP2C + 1$ で与えられる。
11 ~ 20	IP1C	not in use
21 ~ 30	LVCT	計数值調整の数 (ICONT, DOWN)
31 ~ 40	IDIR	ガウス関数フィッティングに用いるデータオプション 0/1 Smooth data/Experimental data
41 ~ 50	KP	一次微分のポイント数は、 $2 * KP + 1$ で与えられる。
51 ~ 60	IDMPG	収束状態 output option OFF/ON - 0/1

Line 4. (F 12.4)

1 ~ 12	P2COL	感度係数
--------	-------	------

Line 5. (4(I6,F12.3))

1 ~ 6	ICONT(I)	ピークサーチの時使用する全解析領域内でのチャンネル当り
7 ~ 18	DOWN (I)	の計数值 T counts/ch であるとする
	⋮	ICONT(I) ≤ T ≤ ICONT (I+1) であるなら全計数值を
	ICONT (LVCT)	DOWN(I)で除算を行ったデータでピークサーチを行う。
	DOWN (LVCT)	

Line 6. (6 I 10)

1 ~ 10	I REG (I)	解析するチャンネルの指定
	⋮	
	I REG (ISET)	

### 3.1.2 制御文のインプット

制御文は、この小型計算機の最大特徴である対話形式で行う。定数のインプットファイル (name ; EUCONS . INP) を Table 4 を用い、測定された  $\gamma$  線スペクトル実験データファイルは、EU 010001J . X 12 の 1 ファイルのみ解析を行う場合以下に示す形式でインプットすればよい。下線部分が制御文インプットでありターミナルより入力するものである。その他は、プログラムからのメッセージである。解析結果のファイル名を EU . DMP とした。

```
RUN GSFIT
```

```
    << Gaussian-fitting Program >>
```

```
Input No. of file ?           : 1
  1-th data file name ?      : EU010001J.X12
Input constance file-name ?  : EUCONS.INP
Input final dump file-name ? : EU.DMP
```

### 3.2 アウトプット

前項でのインプットファイルを Table 4 の様に作成し  $\gamma$  線スペクトル実験データファイル EU010001J . X 12 解析結果のアウトプットを Table 5 ~ 8 に示す。

Table 5 は、インプットされた種々の定数のアウトプットである。Table 6 は、 $\gamma$  線スペクトルの実験データと平滑化されたデータの 2250 ch ~ 2350 ch のアウトプットである。Table 7 は、ピークサーチを行った結果およびサブルーチン "ANAREA" および "REANA" で着目ピークとして、2300ch を与え決定された解析領域のアウトプットである。Table 8 は、解析結果のアウトプットである。初期値の行列式の各要素 (NO. 0)、次に収束条件 ( $10^{-6}$ ) を満足した所で計算を終了した行列式の各要素のアウトプットである。最後に解析結果として左より

- (1) 解析領域内での低エネルギー側よりのピーク順番号
- (2) ピーク中心チャンネル

- (3) ピーク中心チャンネルの計数値
- (4) FWHM (Full Width at Half Maximum)
- (5) ピーク面積
- (6) モデル関数と残差により求めた誤差
- (7) ベース部分の計数値
- (8) ピーク部分とベース部分の総計数値
- (9) 統計誤差

のように表わされ、次行には、残差との誤差あるいは統計誤差の大きい方の誤差を(6)の下に相対誤差として示している。

#### 4. 計 算 例

実験データと“GSFIT”を用いて解析した形状関数との比較をFig.3およびFig.4に示す。

Fig.3は、単独ピークの例でありDU(劣化ウラン) フォイルを原子炉内で照射したのちGe検出器で測定した<sup>239</sup>Npからの277.6KeV  $\gamma$ 線スペクトルである。ピーク部分およびベースラインとも非常に良く一致しており、良く実験値を再現していると考えられる。また計数値積算法によりピーク面積および誤差を算出したところ“GSFIT”での解析結果と良く一致していた。

Fig.4は、多重ピークの例であり、EU(濃縮ウラン) フォイルをDUフォイルと同様照射し測定した<sup>133</sup>Iからの530KeVを着目ピーク(図の計数の高いピーク)として解析した結果である。低エネルギー側にFPによる2つのピークを含んでいる。弱いピークの部分および着目ピークの高エネルギー側の裾に少しの不一致が見られるが全体として、良く実験値を再現している。またこれは、着目ピークのピーク面積に対する影響は、0.5%以内であった。

$\gamma$ 線スペクトル形状のモデル関数として、ピーク部分のガウス関数とベース部分の一次式で表わすことで十分満足すると云える。

#### 5. 結 語

フォイル解析においては、着目ピークの面積および誤差が正確に算出されなければならない。前章の例からもわかるように着目ピークの近傍に他のFPがある場合の影響の割合を定量的に算出し取除かなければならない。これは、本プログラムで使用している関数フィッティング法を必要とすることを意味している。またピーク面積の信頼度を計数値積算法で求めた値と比較検討した結果は、非常に良く一致していた。これらは、本プログラムのピーク面積および誤差の算出がFCAにおいて計画されているようなfission-foilを使用して、FPの $\gamma$ 線スペクトル解析を行うに十分満足なものであることを示している。

- (3) ピーク中心チャンネルの計数値
- (4) FWHM (Full Width at Half Maximum)
- (5) ピーク面積
- (6) モデル関数と残差により求めた誤差
- (7) ベース部分の計数値
- (8) ピーク部分とベース部分の総計数値
- (9) 統計誤差

のように表わされ、次行には、残差との誤差あるいは統計誤差の大きい方の誤差を(6)の下に相対誤差として示している。

#### 4. 計 算 例

実験データと“GSFIT”を用いて解析した形状関数との比較をFig.3およびFig.4に示す。

Fig.3は、単独ピークの例でありDU(劣化ウラン) フォイルを原子炉内で照射したのちGe検出器で測定した<sup>239</sup>Npからの277.6KeV  $\gamma$ 線スペクトルである。ピーク部分およびベースラインとも非常に良く一致しており、良く実験値を再現していると考えられる。また計数値積算法によりピーク面積および誤差を算出したところ“GSFIT”での解析結果と良く一致していた。

Fig.4は、多重ピークの例であり、EU(濃縮ウラン) フォイルをDUフォイルと同様照射し測定した<sup>133</sup>Iからの530KeVを着目ピーク(図の計数の高いピーク)として解析した結果である。低エネルギー側にFPによる2つのピークを含んでいる。弱いピークの部分および着目ピークの高エネルギー側の裾に少しの不一致が見られるが全体として、良く実験値を再現している。またこれは、着目ピークのピーク面積に対する影響は、0.5%以内であった。

$\gamma$ 線スペクトル形状のモデル関数として、ピーク部分のガウス関数とベース部分の一次式で表わすことで十分満足すると云える。

#### 5. 結 語

フォイル解析においては、着目ピークの面積および誤差が正確に算出されなければならない。前章の例からもわかるように着目ピークの近傍に他のFPがある場合の影響の割合を定量的に算出し取除かなければならない。これは、本プログラムで使用している関数フィッティング法を必要とすることを意味している。またピーク面積の信頼度を計数値積算法で求めた値と比較検討した結果は、非常に良く一致していた。これらは、本プログラムのピーク面積および誤差の算出がFCAにおいて計画されているようなfission-foilを使用して、FPの $\gamma$ 線スペクトル解析を行うに十分満足なものであることを示している。



- (3) ピーク中心チャンネルの計数値
- (4) FWHM (Full Width at Half Maximum)
- (5) ピーク面積
- (6) モデル関数と残差により求めた誤差
- (7) ベース部分の計数値
- (8) ピーク部分とベース部分の総計数値
- (9) 統計誤差

のように表わされ、次行には、残差との誤差あるいは統計誤差の大きい方の誤差を(6)の下に相対誤差として示している。

## 4. 計 算 例

実験データと"GSFIT"を用いて解析した形状関数との比較をFig.3およびFig.4に示す。

Fig.3は、単独ピークの例でありDU(劣化ウラン) フォイルを原子炉内で照射したのちGe検出器で測定した<sup>239</sup>Npからの277.6KeV  $\gamma$ 線スペクトルである。ピーク部分およびベースラインとも非常に良く一致しており、良く実験値を再現していると考えられる。また計数値積算法によりピーク面積および誤差を算出したところ"GSFIT"での解析結果と良く一致していた。

Fig.4は、多重ピークの例であり、EU(濃縮ウラン) フォイルをDUフォイルと同様照射し測定した<sup>133</sup>Iからの530KeVを着目ピーク(図の計数の高いピーク)として解析した結果である。低エネルギー側にFPによる2つのピークを含んでいる。弱いピークの部分および着目ピークの高エネルギー側の裾に少しの不一致が見られるが全体として、良く実験値を再現している。またこれは、着目ピークのピーク面積に対する影響は、0.5%以内であった。

$\gamma$ 線スペクトル形状のモデル関数として、ピーク部分のガウス関数とベース部分の一次式で表わすことで十分満足すると云える。

## 5. 結 語

フォイル解析においては、着目ピークの面積および誤差が正確に算出されなければならない。前章の例からもわかるように着目ピークの近傍に他のFPがある場合の影響の割合を定量的に算出し取除かなければならない。これは、本プログラムで使用している関数フィッティング法を必要とすることを意味している。またピーク面積の信頼度を計数値積算法で求めた値と比較検討した結果は、非常に良く一致していた。これらは、本プログラムのピーク面積および誤差の算出がFCAにおいて計画されているようなfission-foilを使用して、FPの $\gamma$ 線スペクトル解析を行うに十分満足なものであることを示している。

またこのプログラムの一つの大きな特徴は、小型の容量の計算機を用いて $\gamma$ 線スペクトルの解析が迅速におこなえる点にある。これは、 $\gamma$ 線スペクトルの測定および解析が自動的に1つの計算機で行え、数々のユーティリティソフト<sup>7)</sup>を追加することにより、核分裂率比および分布測定を計数管並みの簡便さで実現可能になったことを示しており、次期炉心としてFCAで計画されている軸方向非均質炉心における実験での核分裂率測定および捕獲反応率測定が飛躍的な発展をもたらすものと考えられる。

本コードの適用において、解析する2つのピークがかなり接近する場合に発散が起こることが1つの問題となる。この現象は、ピーク間隔が半値巾の $\frac{1}{2}$ 以内に接近する場合に起こる。しかし現在反応率測定のための着目光電ピーク解析においては、大きな支障がないが、解析ピークを追加する場合に備えこの問題については、今後さらに検討を進めるつもりである。

## 謝 辞

本コードを作成するにあたり種々の御協力を頂いたカナザワコンピューター(株)軍司康義氏に感謝致します。またフォイル測定システムの開発にあたり高速炉物理研究室大部誠氏および有意義なる助言を頂いた高速炉物理研究室飯島進氏、大杉俊隆氏、研究室長吉田弘幸氏および炉物理施設管理室大野秋男氏に感謝する。

## 参考文献

- 1) 笹本宣雄他, "Ge(Li) 検出器によるガンマ線スペクトル解析法" JAERI-M-5556 (1974)
- 2) 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)
- 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) 馬場澄子他, "Ge(Li) 検出器による $\gamma$ 線スペクトルの解析コードBOB70" JAERI-1216 (1971)
- 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) 小坪龍男他, 公刊予定

またこのプログラムの一つの大きな特徴は、小型の容量の計算機を用いて $\gamma$ 線スペクトルの解析が迅速におこなえる点にある。これは、 $\gamma$ 線スペクトルの測定および解析が自動的に1つの計算機で行え、数々のユーティリティソフト<sup>7)</sup>を追加することにより、核分裂率比および分布測定を計数管並みの簡便さで実現可能になったことを示しており、次期炉心としてFCAで計画されている軸方向非均質炉心における実験での核分裂率測定および捕獲反応率測定が飛躍的な発展をもたらすものと考えられる。

本コードの適用において、解析する2つのピークがかなり接近する場合に発散が起こることが1つの問題となる。この現象は、ピーク間隔が半値巾の $\frac{1}{2}$ 以内に接近する場合に起こる。しかし現在反応率測定のための着目光電ピーク解析においては、大きな支障がないが、解析ピークを追加する場合に備えこの問題については、今後さらに検討を進めるつもりである。

## 謝 辞

本コードを作成するにあたり種々の御協力を頂いたカナザワコンピューター(株)軍司康義氏に感謝致します。またフォイル測定システムの開発にあたり高速炉物理研究室大部誠氏および有意義なる助言を頂いた高速炉物理研究室飯島進氏、大杉俊隆氏、研究室長吉田弘幸氏および炉物理施設管理室大野秋男氏に感謝する。

## 参考文献

- 1) 笹本宣雄他, "Ge(Li) 検出器によるガンマ線スペクトル解析法" JAERI-M-5556 (1974)
- 2) 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)
- 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) 馬場澄子他, "Ge(Li) 検出器による $\gamma$ 線スペクトルの解析コードBOB70" JAERI-1216 (1971)
- 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) 小坪龍男他, 公刊予定

またこのプログラムの一つの大きな特徴は、小型の容量の計算機を用いて $\gamma$ 線スペクトルの解析が迅速におこなえる点にある。これは、 $\gamma$ 線スペクトルの測定および解析が自動的に1つの計算機で行え、数々のユーティリティソフト<sup>7)</sup>を追加することにより、核分裂率比および分布測定を計数管並みの簡便さで実現可能になったことを示しており、次期炉心としてFCAで計画されている軸方向非均質炉心における実験での核分裂率測定および捕獲反応率測定が飛躍的な発展をもたらすものと考えられる。

本コードの適用において、解析する2つのピークがかなり接近する場合に発散が起こることが1つの問題となる。この現象は、ピーク間隔が半値巾の $\frac{1}{2}$ 以内に接近する場合に起こる。しかし現在反応率測定のための着目光電ピーク解析においては、大きな支障がないが、解析ピークを追加する場合に備えこの問題については、今後さらに検討を進めるつもりである。

## 謝 辞

本コードを作成するにあたり種々の御協力を頂いたカナザワコンピューター(株)軍司康義氏に感謝致します。またフォイル測定システムの開発にあたり高速炉物理研究室大部誠氏および有意義なる助言を頂いた高速炉物理研究室飯島進氏、大杉俊隆氏、研究室長吉田弘幸氏および炉物理施設管理室大野秋男氏に感謝する。

## 参考文献

- 1) 笹本宣雄他, "Ge(Li) 検出器によるガンマ線スペクトル解析法" JAERI-M-5556 (1974)
- 2) 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)
- 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) 馬場澄子他, "Ge(Li) 検出器による $\gamma$ 線スペクトルの解析コードBOB70" JAERI-1216 (1971)
- 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) 小坪龍男他, 公刊予定

Appendix A 非線形最小自乗法

Qを最小にする条件  $(\partial Q / \partial (\delta C_k))_{k=1, \dots, j} = 0$  なる関係より jケの正規方程式が得られる。  
すなわち下式が得られる。

$$\begin{pmatrix} \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial c_1} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial c_2} & \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial c_1} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial c_2} & \dots & \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial c_1} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial c_j} \\ \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial c_2} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial c_1} & \dots & \dots & \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial c_2} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial c_j} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial c_j} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial c_1} & \dots & \dots & \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial c_j} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial c_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta c_1 \\ \delta c_2 \\ \vdots \\ \delta c_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sum_i \frac{\partial f_i}{\partial c_1} \cdot R_i \\ -\sum_i \frac{\partial f_i}{\partial c_2} \cdot R_i \\ \vdots \\ -\sum_i \frac{\partial f_i}{\partial c_j} \cdot R_i \end{pmatrix}$$

ここで  $R_i = f(x_i, c_k^0) - y_i$

$y_i$  ; iチャンネルでの計数值

モデル関数 ;

$$f(i, c_k) = c_1 + c_2 (i - \ell) + \sum_n [c_{3n} \exp \{ -c_{3n+1} (1 - c_{3n+2})^2 \}]$$

各偏微分を求めると

$$\frac{\partial f_i}{\partial c_1} = 1, \quad \frac{\partial f_i}{\partial c_2} = i - \ell, \quad \frac{\partial f_i}{\partial c_{3n}} = \exp \{ -c_{3n+1}^0 (i - c_{3n+2}^0)^2 \}$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial c_{3n+1}} = -c_{3n}^0 (i - c_{3n+2}^0)^2 \exp \{ -c_{3n+1}^0 (i - c_{3n+2}^0)^2 \}$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial c_{3n+2}} = 2 c_{3n}^0 c_{3n+1}^0 (i - c_{3n+2}^0) \exp \{ -c_{3n+1}^0 (i - c_{3n+2}^0)^2 \}$$

$$R_i = [c_1^0 + c_2^0 (i - \ell) + \sum_n c_{3n}^0 \exp \{ -c_{3n+1}^0 (i - c_{3n+2}^0)^2 \}] - y_i$$

のようになる。

今、 $F \times \Delta = B$ としてその逆行列  $F^{-1}$ より  $\Delta = F^{-1} \times B$ であるから各偏微分の値を①式に代入して、 $\delta c_1, \delta c_2, \dots, \delta c_j$ を求める。逆行列の求め方は、掃き出し法による。

次に  $c_1^0 + \delta c_1, c_2^0 + \delta c_2, \dots, c_j^0 + \delta c_j$ をそれぞれ  $c_1^0, c_2^0, \dots, c_j^0$ として再び上の行列式を解く。この繰り返し計算を  $\delta c_k$ が収束条件より小さくなるまで行って計算を終了し、その時のピーク面積、ピークチャンネル等各々の値を与えられた式より求める。

Table 1 A polynomial least squares filter

$I\bar{O}RD$	Points	$N_{I\bar{O}RD}$	$C_0$	$C_1, C_{-1}$	$C_2, C_{-2}$	$C_3, C_{-3}$	$C_4, C_{-4}$
2	5	35	17	12	-3	—	—
3	7	21	7	6	3	-2	—
4	9	231	59	54	39	14	-21

Table 2 a and KP value for a first differential filter

KP	Points	a
1	3	2
2	5	10
3	7	28

Table 3 Gaussian function a second differential filter

IP2C	$A_0$	$A_{1,-1}$	$A_{2,-2}$	$A_{3,-3}$	$A_{4,-4}$	$A_{5,-5}$	$A_{6,-6}$
1	-10	5	---	---	---	---	---
2	-10	-3	8	---	---	---	---
3	-10	-1	5	1	---	---	---
4	-10	-3	4	3	1	---	---
6	-8	-5	-1	4	3	2	1

Table 4 Input format

file name : EUCONS. INP

```

            1          2          3          4          5          6          7          8
-----5-----0-----5-----0-----5-----0-----5-----0-----5-----0-----5-----0-----
1 :          1          1          2250          2350          6
2 :          2          2           1           6
3 :          3          1           4           0           2           0
4 :         2.5000
5 :          0          1.000  400          3.000  650          5.000  800          10.000
6 :         1261          1571          2300          2863          2905          3237
            1          2          3          4          5          6          7          8
-----5-----0-----5-----0-----5-----0-----5-----0-----5-----0-----
Total cards =                                  6
    
```

Table 5 Input data list

\*\*\* Gaussian-Fitting Input List \*\*\*

File name of constance table	:	EU.DMP				
No. of input file	:	1				
File name	:	EU010001J.X12				
Order Option of calculate	:	1				
Input data dump, (0/1=NO/YES)	:	1				
Calculate start-up point	:	2250				
Calculate ending point	:	2350				
Taken Channel NO.	:	6				
1261    1571    2300    2863    2905    3237						
Smooth routine ( 0=off	)					
( 1=Gaus-filter	)					
( 2=Least squares filter )	:	2				
Smooth Sum-up resion	:	2				
Smooth data dump (0/1=off/on)	:	1				
Analysis area set range	:	6				
2-Diff. Sum-up Region	:	3				
1-Diff. (1/2=Num/min-max[dummy])	:	1				
NO. of counts device constance	:	4				
2-Diff. ins/cancel multiple const.	:	2.50000				
Gaus-fit option (0/1=smooth/direct)	:	0				
1-Diff. sum-up region	:	2				
Constance for counts device	:	0	1.000			
		400	3.000			
		650	5.000			
		800	10.000			



Table 6 OUTPUT for experimental data and smoothing results

	<< Input data >>											
File name :	EU010001J.X12											
File title:	EU010001J.X12											
2250 :	117	115	142	116	114	119	112	123	126			
2260 :	117	122	131	161	161	221	253	294	287			
2270 :	289	181	138	140	113	122	127	126	103			
2280 :	137	207	215	273	359	363	309	254	208			
2290 :	184	124	133	180	333	641	1260	2102	2999			
2300 :	3479	2778	1875	1105	525	313	181	163	137			
2310 :	117	98	122	112	121	122	120	109	118			
2320 :	119	114	125	112	117	105	141	119	142			
2330 :	171	232	257	247	200	152	126	140	127			
2310 :	111	89	102	101	126	00	108	122	114			
2350 :	127											
-----												
	Least squares filter smoothing normal end -											
	- LEVEL = 2											
	-----											
	<< Smooth data >>											
2250 :	116	114	124	124	114	114	116	121	123			
2260 :	120	118	121	149	177	211	260	284	297			
2270 :	278	238	178	128	122	118	128	117	118			
2280 :	117	151	193	290	345	359	312	253	213			
2290 :	172	139	118	181	323	661	1266	2128	2960			
2300 :	3508	3439	2807	1891	561	285	194	151	136			
2310 :	123	111	112	118	118	122	117	113	116			
2320 :	115	110	111	118	108	119	123	131	138			
2330 :	172	205	236	243	201	152	133	132	126			
2340 :	120	109	102	111	111	109	107	116	122			
2350 :												

Table 7 OUTPUT from peak search routine

```

***** Peak search out put *****
Start channel, end channel :      2250      2350
2-dim. sum-up region      :          3
2-dim. devi. constance   :      2.5000
1-dim. sum-up region      :          2
NO. of peak               :          4
    
```

NO.	peak channel	data(i)
1	2268.77368	284
2	2285.66357	345
3	2300.39331	3508
4	2332.99487	236

```

***** Analysis out-put *****
Given area ( start --->end )      2250      2350
NO. of analysis area
NO.      Start      end
  1      2256      2313
  2      2325      2343
    
```

```

*** Selected peak point ***
NO. of selected point :          6
    1261    1574    2300    2863    2905    3237
    
```

```

***** REANA dump *****
NO. of region =
1      2256      2313
    
```

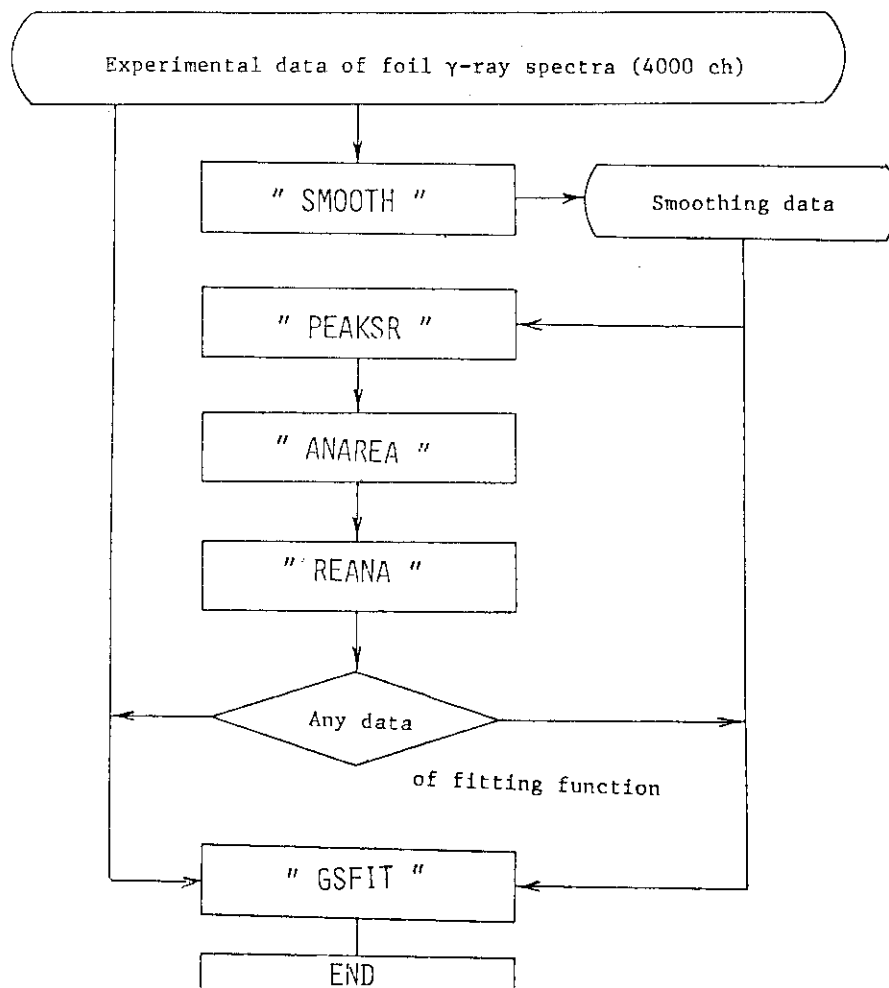


Fig.1 Flow chart of analysis

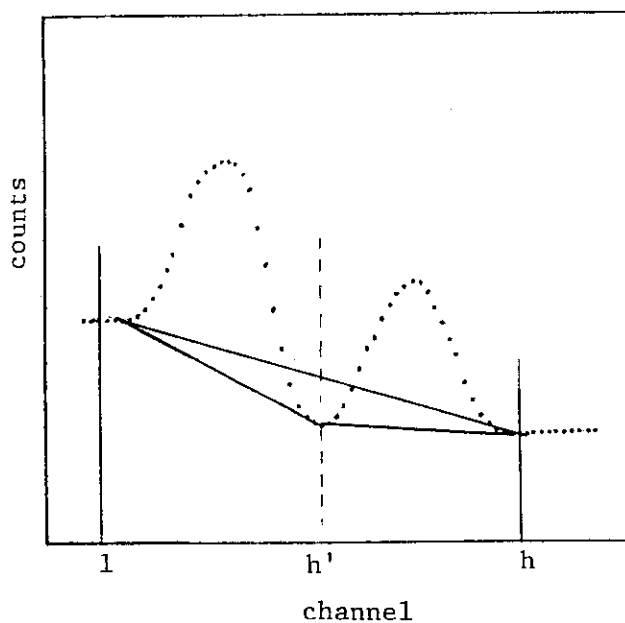


Fig.2 Analysis area for subroutine "REANA"

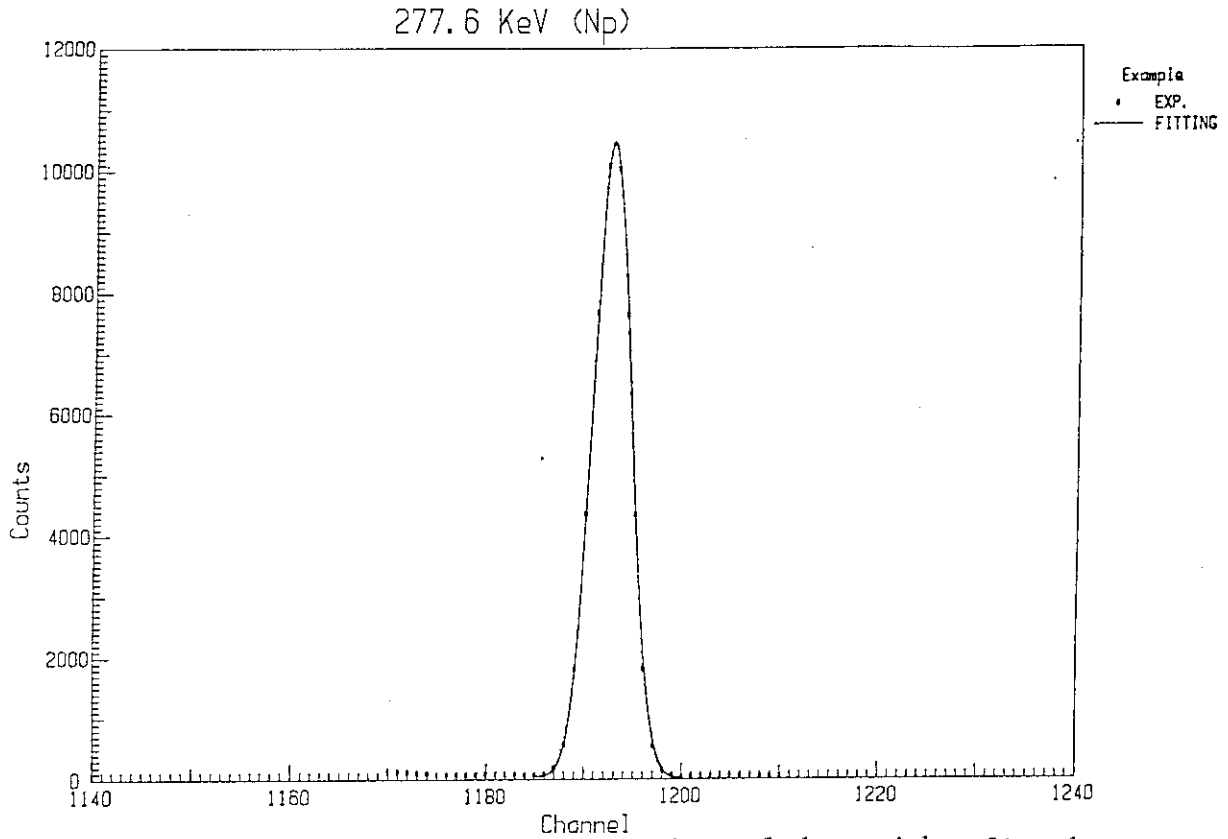


Fig. 3. Comparison of the experimental data with fitted results for  $^{239}\text{Np}$

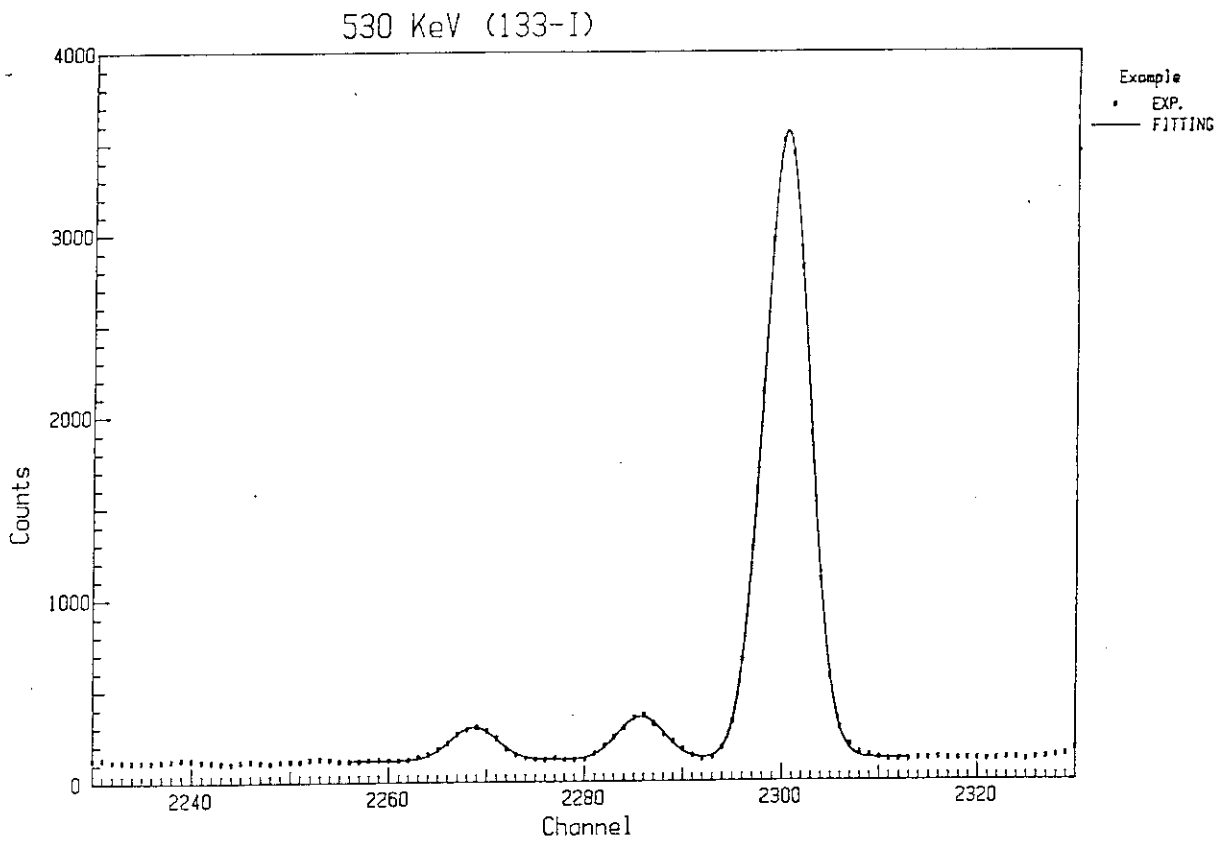


Fig. 4. Comparison of the experimental data with fitted results for  $^{133}\text{I}$

## Appendix B. サブルーテン“GSFIT” リスト

FORTRAN-77 V4.1-2  
FTNF1

11:37:32  
/F77/TR1BLOCKS/WE

26-Apr-84

Page 1

```

C-----
C      -      GAUSSIAN FITTING ROUTINE      -
C      -      Created day      :1984-01-01  -
C      -      Last Update      :1984-02-28  -
C-----
C
0001  SUBROUTINE  GSFIT(IDATA ,MAXS ,IYSTRT ,IEND ,NPEAK , FPEAK ,MAXP,
      2          EPCI ,KEY ,LPEND ,IUMP )
C-----
C-      Argument      Comment      -
C-      IDATA      counted data (usually smoothing data)      -
C-      MAXS      IDATA data size      -
C-      IYSTRT      analysis starting point      -
C-      IEND      analysis ending point      -
C-      NPEAK      NO. of peak      -
C-      FPEAK      peak data (calculated in PEAKSR )      -
C-      IAREA      dimension size      -
C-      COMD      function constance      -
C-      COMD( 1 ) : base counts      -
C-      COMD( 2 ) : constance of increase      -
C-      COMD(3*I ) : counts on I-th peak      -
C-      COMD(3*I+1) : 2.773/FWHM**2      -
C-      COMD(3*I+2) : peak center value      -
C-      IDDN      calculated data out put dd-name      -
C-      if negative ,not dump      -
C-      EPCI      calculate cut-off line      -
C-      KEY      return code 0/normal/abnormal      -
C-----
0002  DIMENSION FPEAK(MAXP) ,RFTIM(2) ,IDATE(5) ,CRFF(3)
0003  VIRTUAL  IDATA(4100) ,WORK(17,17),DELB(2,17) ,B(17) ,COMD(17)
0004  INTEGER*4      IDATA
0005  IAREA =17
C-----
0006  MM3 =3*NPEAK +2
0007  IF(MM3.LE.IAREA) GO TO 3010      ! WORK,B,area check
0008  WRITE(6,6010) NPEAK ,IAREA ,MM3
0009  STOP 971
0010  6010 FORMAT('**** ERROR memory area less than request area ***/
      2      ' NO. of peak ,divon dimension ,request area ',3I10)
C-----
0011  3010 CONTINUE
C      IF(MAXS.LE.MAXD) GO TO 3020      ! counts area check
C      WRITE(6,6020) MAXS ,MAXD
C      STOP 972
C 6020 FORMAT('***** ERROR counts area error ',2I10)
C-----
C 3020 CONTINUE
C      IF(NPEAK.LE.MAXP) GO TO 3030      ! peak area check
C      WRITE(6,6030) NPEAK ,MAXP
C      STOP 973
C 6030 FORMAT('***** ERROR peak data area error ',2I10)
C-----
C 3030 CONTINUE

```

```

C      IF(ISTRT.GT.0.AND.IEND.LE.MAXS) GO TO 3040 ! channel NO. check
C      WRITE(6,6040) ISTRT ,IEND ,MAXS
C      STOP 974
C 6040 FORMAT('O***** ERROR channel NO. error '//
C      2.      ' start point,end point ,max data ',3I20)
C-----
C 3040 CONTINUE
C      IF(EPCI.LE.1.0E-20) EPCI =1.0E-05
C-----
C- First array re-sorts -
C-----
0012      KEY      =0
0013      COMD(1)  =(IDATA(ISTRT) +IDATA(IEND))/2
0014      IF(IDATA(ISTRT).LT.COMD(1)) COMD(1) =IDATA(ISTRT)
0015      COMD(2)  =0.0
0016      DDMAX    =0.
0017      FMEAN    =0.
0018      CONSD    =0.5
0019      IMAX     =1
0020      C3N     =0.0
0021      DO 4010 I=1,NPEAK
0022          II   =3*I
0023          ILPK =FPEAK(I) +0.31
0024          COMD(II) =IDATA(ILPK) -COMD(1)
C      2          IF(IDATA(ILPK).LT.IDATA(ILPK+1))
C                  COMD(II)=IDATA(ILPK+1)-COMD(1)
C      IF(COMD(II).LE.0.) COMD(II) =1.0 ! peak counts check
0025      DDMAX    =DDMAX +FWHMSR(IDATA,MAXS,ISTRT,IEND,FPEAK,MAXP,I)
0026      COMD(II+2)=FPEAK(I)
0027      FMEAN    =FMEAN +COMD(II)
0028      IF(C3N.GT.COMD(II)) GO TO 4010 ! Max peak counts
C+++++
0029      IMAX     =I ! max NO. of peak
0030      C3N     =COMD(II) ! MAX NO. update
0031      4010 CONTINUE
0032      IDMAX    =DDMAX/FLOAT(NPEAK) ! mean of FWHM
0033      FMEAN    =FMEAN/FLOAT(NPEAK) ! mean of peak
0034      DO 4020 I =1,NPEAK
0035          COMD(3*I+1)=DDMAX
0036          DELB(1,I) =2.0
0037          DELB(2,I) =DDMAX
0038          IF(COMD(3*I).GT.FMEAN) DELB(1,I) =0.5
0039      4020 CONTINUE
0040      VAR1     =2.5
0041      LOOP     =0
0042      TIM      =SECONDS(0.0) ! ITERATION TIME
0043      CALL TIME(RFTIM) ! STARTING TIME
0044      CALL DATE(IDATE) ! DATE READING
C      IF(IDMP.GT.0)
0045          WRITE(6,6000) IDATE ,RFTIM ,ISTRT ,IEND ,(JJ,JJ=1,MM3)
C      IF(IDMP.GT.0)
0046          WRITE(6,6200) LOOP ,RFTIM ,(COMD(I),I=1,MM3)
0047      6000 FORMAT('1'//20X,'***** fitting function calculate *****/
C      2          50X,'DATE & TIME : ',5A2,10X,2A4,

```

```

2      ' Starting ---> End ' ,2I10 //
3      7X,'NO. ',6X,'TIME',5(15X,'C',I4)/(60X,3(15X,'C',I4))
0048  6200 FORMAT(/I10,2X,2A4 ,2F20.7,3F20.7/(60X,3F20.7))
C-----
0049      MISOUT  =0
0050      LOOP    =1
0051      KISS    =0
0052      3100 CONTINUE
C-----
C-   matrix calculation   -
C-----
0053      DO 4110 I =1,MM3
0054          II   =I
0055      DO 4120 J =1,MM3
0056          JJ   =J
0057          IF(JI.GT.JJ) GO TO 3130           !under triangle
0058          WORK(I,J) =0.0
0059      DO 4130 K =ISTRT,JEND
0060          KK   =K
0061          WORK(I,J) =WORK(I,J) +DELTA(COMB,IAREA,II,KK,ISTRT)
                                *DELTA(COMB,IAREA,JJ,KK,ISTRT)
2
0062  4130      CONTINUE
0063          GO TO 4120
C
0064  3130      CONTINUE
0065          WORK(I,J) =WORK(J,I)
0066  4120      CONTINUE
C-----
C-   vector B calculation   -
C-----
0067          B(I) =0.
0068      DO 4140 K =ISTRT,JEND
0069          KK   =K
0070          RK   =0.
0071      DO 4150 L=1,NPEAK
0072          L3   =3*L
0073          RK   =RK +COMB(L3)*EXP(-COMB(L3+1)*(K-COMB(L3+2))**2)
0074  4150      CONTINUE
0075          RK   =RK +COMB(1) +COMB(2)*(KK-ISTRT) -IDATA(KK)
0076          B(I) =B(I) -RK*DELTA(COMB ,IAREA ,II ,KK ,ISTRT)
0077  4140      CONTINUE
0078  4110 CONTINUE
C-----
C-   matrix sweep out   -
C-----
0079      DO 4200 I =1,MM3
0080          IF(ABS(WORK(I,I)).LE.1.0E-20) GO TO 3140 ! device check
C-----
C-   MATRIX WORK sweep out   -
C-----
0081          PIVOT =1.0/WORK(I,I)
0082          WORK(I,I) =1.0
0083      DO 4201 J =1,MM3
0084          WORK(I,J) =WORK(I,J)*PIVOT
0085  4201      CONTINUE

```

FORTRAN-77 V4.1-2  
FTN:1

11:37:32

26-APR-84

Page 4

/F77/TR:BLOCKS/WR

```

0086      DO 4202 K =1,MM3
0087          IF(I.EQ.K)          GO TO 4202
0088          AIK      =WORK(K,I)
0089          WORK(K,I) =0.0
0090          DO 4203 J =1,MM3
0091              WORK(K,J) =WORK(K,J) -AIK*WORK(I,J)
0092      4203      CONTINUE
0093      4202      CONTINUE
0094          GO TO 4200
0095      3140      CONTINUE
0096          MISOUT =MISOUT +1
0097          WRITE(6,6100) MISOUT ,I ,WORK(I,I)
0098          IF(MISOUT.GE.6) GO TO 9910
0099      4200      CONTINUE
0100      6100      FORMAT('***** WARNING device in sweep out ',2I20,1PE20.6)
-----
C
C
0101      IF(KISS.GE.MM3      )          GO TO 3500      ! iteration check
0102      IF(LOOP.GT.50      )          GO TO 3500      ! iteration check
0103      IF(LOOP.GT.LPEND  )          GO TO 3500      ! iteration check
C*****
C-----
C-  matrix*vector =Delta C      -
C-----
0104          KISS      =0
0105          DO 4310 J =1,2
0106              FF      =0.
0107              DO 4320 J =1,MM3
0108                  FF      =FF +WORK(I,J)*R(J)
0109      4320      CONTINUE
0109          DELC      =CONP(I) +FF
0110          IF(I.ER.1.AND.DELC.LE.0.0)  GO TO 3310
0111
C-----
C-  normal update      -
C-----
0112          CONP(I)=DELC
0113          IF(ABS(FF).LE. 10.0*EPCI.AND.J.ER.2)  KISS =KISS +1
0114          IF(ABS(FF).LE.100.0*EPCI.AND.I.EQ.1)  KISS =KISS +1
0115          GO TO 4310
C
0116      3310      CONTINUE
C          CONP      =CONP(I)          ! abnormal update
C          LOPEND    =LOPEND +1      ! taken before value
0117          WRITE(6,6310) J ,FF ,CONP(I)
0118      6310      FORMAT('***** WARNING ',I5,'-TH DATA value ('',1PE15.5,'')',
2          ' was ignore ---- value taken before value.',1E15.5)
C          IF(LOOP.GT.LPEND)  GO TO 9910
0119      4310      CONTINUE
-----
C-  C3n,c3n+1,c3n+2      -
C-----
0120          DO 4330 I =1,NPEAK
0121              DO 4331 J =1,3
0122                  II      =3*I +J-1
0123                  C3N      =0.0

```



FORTRAN-77 V4.1-2  
FTN#111:37:32 26-Apr-84  
/F77/TR:BLOCKS/WR

Page 5

```

0124          DO 4332 K =1,NM3
0125             C3N   =C3N +WORK(II,K)*B(K)
0126 4332      CONTINUE
0127             WORK(II,1)=C3N +COND(II)
0128             WORK(II,2)=C3N
0129             WORK(II,3)=COND(II)
0130             IF (ABS(C3N).LE.      EPCI.AND..J.EQ.2)      KISS =KISS +1
0131             IF (ABS(C3N).LE.100.0*EPCI.AND..J.NE.2)      KISS =KISS +1
0132 4331      CONTINUE
0133 4330 CONTINUE
0134             IF (LOOP.GE.3)          VAR1      =2.3
0135             IF (LOOP.GT.4)          GO TO 3350

C
0136      DO 4340 I =1,NPEAK             ! firstre-set C3n+1
0137         I3      =3*I +1             !
0138         IF (LOOP.GE.3.AND.DELB(1,I).LE.0.6) DELB(1,I) =0.8
0139         IF (LOOP.GE.3.AND.DELB(1,I).GE.1.1) DELB(1,I) =1.5
0140         DO 4341 J =1,3
0141            IF (WORK(I3,1).LE.0.0.AND.DELB(2,I).LE.WORK(I3,2) )
2                DELB(1,I) =VAR1 -DELB(1,I)

0142             II      =3*I +J -1
0143             C3N     =COND(II)
0144             IF (WORK(II,1).GT.0.0) GO TO 3321

C
0145             WRITE(6,6320) II ,WORK(II,1) ,I3,DELB(1,I)
0146 6320 FORMAT('0**** WARNING ',I5,'-th data value (' ,IPE15.5,' ) was',
2             ' ignore ',I5,'-th data was changed by ',F15.5)
C             COND(3*I+1)=DDMAX*DELB(1,I)      ! C3n+1 update
0147             WORK(I3,1)=DELB(1,I)*COND(I3)
C             IF (LOOP.GT.LPEND)      GO TO 9910

0148 4341      CONTINUE
0149             GO TO 4340
0150 3321      CONTINUE
0151             COND(I3)      =WORK(I3,1)
0152 4340 CONTINUE

C
0153      DO 4342 I =1,NPEAK
0154         II      =3*I +1
0155         DELB(2,I) =WORK(II,2)
0156         IF (0.0009.LE.COND(II).AND.COND(II).LE.3.0) GO TO 4342
0157         WRITE(6,6340)      II      ,COND(II)
0158         IF (NPEAK.EQ.1)          CONDB(II) =DDMAX
0159         IF (NPEAK.NE.1.AND.CONDB(3*IMAX+1).GT.0.0)
2             CONDB(II) =CONDB(3*IMAX+1)
0160         IF (NPEAK.NE.1.AND.CONDB(3*IMAX+1).LE.0.0)
2             CONDB(II) =DDMAX
C             IF (LOOP .GT.LPEND)      GO TO 9910

0161 4342 CONTINUE
0162             GO TO 3410

C
0163 3350 CONTINUE
0164      DO 4350 I =1,NPEAK
0165         II      =0
0166         DO 4351 J =1,3
0167            I3      =3*I +J -1

```

```

FORTRAN-77 V4.1-2          11:37:32    26-Apr-84          Page 6
FTN#1          /F77/TR:BLOCKS/NR

0168          IF(WORK(I3,1).LE.0.0)    GO TO 3351
0169          COND(I3) =WORK(I3,1)      ! normal update
0170  4351     CONTINUE
0171          GO TO 4350

C
0172  3351     CONTINUE
0173          IJ =3*I +1
0174          IF(DEL B(1,I).GT.ABS(WORK(IJ,2))) GO TO 3352
0175          IF(DEL B(2,I).LE.WORK(IJ,3))    GO TO 3355
0176          GO TO 3356

C
0177  3352     CONTINUE
0178          IF(DEL B(2,I).LE.WORK(IJ,3))    GO TO 3356
0179          GO TO 3355

C
0180  3355     CONTINUE
0181          CONSD =0.9
0182          GO TO 3359

C
0183  3356     CONTINUE
0184          CONSD =1.1
0185          GO TO 3359

C
0186  3359     CONTINUE
0187          DEL B(1,I) =ABS(WORK(IJ,2))
C           IF(LOOP.GT.LPEND)    GO TO 9910
0188          WRITE(6,6330) I3 ,WORK(I3,1) ,IJ ,CONSD ,COND(IJ)
0189  6330  FORMAT('0**** WARNING 'I5,'-th DATA value ('E15.5,') ',
2         ' was ignore ---- 'I5,'-th data was changed by 'E15.5/
3         '31X,E20.5)

C           WORK(IJ,1) =WORK(IJ,3)*CONSD
0190          WORK(IJ,1) =COND(IJ)*CONSD
0191          DEL B(2,I) =ABS(WORK(3*I+1,3))

C-----
C-   data check   -
C-----
C           I3      =3*I
C           C3N     =COND(3*I)      -11.5*COND(1)
C           IF(C3N.LE.0.0)    C3N =1.0
C           FF      =COND(3*I)      +10.5*COND(1)
C           IF(C3N.LE.WORK(I3,1).AND.WORK(I3,1).LE.FF)
C                                     GO TO 3361
C           2
C           WRITE(6,6340) I3 ,WORK(I3,1)
C           IF(LOOP.GT.LPEND)    GO TO 9910
0192  6340  FORMAT('0**** WARNING 'I5,'-th data value ('1PE15.5,') ',
2         ' changed to first value ,cause over/ or under ')
C           WORK(I3,1) =IDATA(ILPK) -COND(1)
C           IF(WORK(I3,1).LE.0.0) WORK(I3,1) =1.0
C
C 3361  CONTINUE
C           I3      =3*I +1
C           IF(0.0005.LE.WORK(I3,1).AND.WORK(I3,1).LE.50.0) GO TO 3362
C           WRITE(6,6340) I3 ,WORK(I3,1)
C           WORK(I3,1) =COND(3*I*MAX+1)*CONSD
C                                     GO TO 9910
C           IF(LOOP.GT.LPEND)

```

```

C
C 3362 CONTINUE
C      I3      =3*I +2
C      IF(NPEAK.EQ.1)          GO TO 3369
C      IF(I      ,ER.1)        GO TO 3363
C      IF(NPEAK.EQ.I)          GO TO 3364
C-----
C      IF(WORK(I3-3,1).LT.WORK(I3,1).AND.WORK(I3,1).LT.WORK(I3+3,1))
C      2          GO TO 3369
C      WRITE(6,6340) I3 ,WORK(I3,1)
C      WORK(I3,1)      =FPEAK(I)
C      IF(LOOP.GT.LPEND)          GO TO 9910
C      GO TO 3369
C-----
C 3363 CONTINUE
C      IF(WORK(I3,1).LT.WORK(I3+3,1))          GO TO 3369
C      WRITE(6,6340) I3 ,WORK(I3,1)
C      WORK(I3,1)      =FPEAK(I)
C      IF(LOOP.GT.LPEND)          GO TO 9910
C      GO TO 3369
C-----
C 3364 CONTINUE
C      IF(WORK(I3-3,1).LT.WORK(I3,1))          GO TO 3369
C      WRITE(6,6340) I3 ,WORK(I3,1)
C      WORK(I3,1)      =FPEAK(I)
C      IF(LOOP.GT.LPEND)          GO TO 9910
C      GO TO 3369
C 3369 CONTINUE
0193      COMD(3*I +1) =WORK(3*I +1,1)          ! C3n+1 update
0194      IF(IT.GE.2)          GO TO 4350
0195      COMD(3*I ) =WORK(3*I ,1)          ! C3n  update
0196      COMD(3*I +2) =WORK(3*I +2,1)          ! C3n+2 update
0197      4350 CONTINUE
C*****
0198      3410 CONTINUE
0199      CALL TIME(RFTIM)
0200      IF(IDMP.GT.0)
0201      2          WRITE(6,6200) LOOP ,RFTIM ,(COMD(I),I=1,MM3)
0202      LOOP =LOOP +1
0203      GO TO 3100
C
C-----
0203      3500 CONTINUE
0204      IF(IDMP.GT.0)  WRITE(6,6201)
0205      6201      FORMAT('1')
0206      LOOP =LOOP -1
0207      IF(IDMP.LE.0)
0208      2          WRITE(6,6200) LOOP ,RFTIM ,(COMD(I),I=1,MM3)
0209      TIM =SECONDS(TIM)
0210      JIKAN=TIM/3600.0
0211      JIFUN=(TIM-FLOAT(JIKAN)*60.)/60.
0212      JIFOU=TIM -FLOAT(JIKAN)*3600.0 -FLOAT(JIFUN)*60.0
0213      WRITE(6,6400) LOOP ,JIKAN ,JIFUN ,JIFOU ,EPCI
0213      6400 FORMAT(/20X,'End of iteration iteration counts =',I10,

```

FTN:1

/F77/TR:BLOCKS/WR

```

      2  — 10X,' iteration time      = ',I5,' ',I2,' ',I2/
      3  — 10X,' delta limited line = ',IPE15.5)
-----
C- area & error counts
-----
0214      DDMAX =IFND -JSTRT +1
0215      VAWA  =0.
-----
C-----<< Statical error calculation >>-----
C      TOTCNT =0.
C      TOTERR =0.0
C      TOTAL  =0.
-----
0216      DO 4610 I =ISTRT,IEND
0217      VARI  =0.
-----
C-----<< Statical error calculation >>-----
C      TOTAL  =TOTAL  +IDATA(I)
C      TOTCNT =TOTCNT +(IDATA(I) -(COND(1)+COND(2)*(I-ISTRT)))
C      TOTERR =TOTERR +(COND(1) +COND(2)*(I-ISTRT))**2
-----
0218      DO 4620 J =1,NPEAK
0219      J3   =3*J
0220      VARI  =VARI +COND(J3)*EXP(-COND(J3+1)*(I-COND(J3+2))**2)
0221  4620  CONTINUE
0222      VARI  =VARI +COND(1) +COND(2)*(I-ISTRT)
0223      VAWA  =VAWA +(VARI-IDATA(I))**2
0224  4610  CONTINUE
-----
C-----<< Statical error calculation >>-----
C      TOTAL1  =TOTAL -TOTCNT
C      TOTERR  =SQRT(TOTCNT +TOTERR)
-----
C      WRITE(3,1100) NPEAK ,ISTRT ,IEND ,TOTAL ,TOTCNT ,
C      2          TOTERR ,TOTAL1
0225  WRITE(3,1100) NPEAK ,ISTRT ,IEND
0226  WRITE(3,1200) (COND(I) ,I =1 ,N3)
0227  WRITE(6,6600) ISTRT ,IEND ,NPEAK
0228  DO 4630 I =1 ,NPEAK
0229      I3   =3*I
-----
C-----<< BOB-70 Routine >>-----
C      C3N1  =IDATA(ISTRT)
C      C3N2  =IDATA(IEND )
-----
C      JST  =ISTRT
C      IF(I.EQ.1) GO TO 3610
C      K    =COND(I3-1)
C      JSTCNT =30000
C      DO 4640 J =1 ,500
C      IMAX  =COND(I3+2) -J
C      IF(IMAX.IE. ISTRT.OR. K.GT.IMAX) GO TO 4640
C      IF(IDATA(IMAX).GT.JSTCNT ) GO TO 4640
C      JST  =IMAX
C      JSTCNT =IDATA(IMAX)
C 4640  CONTINUE
C 3610  CONTINUE
-----
C      JEN  =IEND

```

FORTRAN-77 V4.1-2  
FTN;1

11:37:32 26-Apr-84  
/F77/TR:BLOCKS/WR

Page 9

```

C          IF(I.EQ.NPEAK)                                GO TO 3620
C          JSTCNT =30000
C          K      =COND(I3+5)
C          DO 4641 J =1,500
C             IMAX =COND(I3+2) +J
C             IF(IMAX.GT.IEND.OR,K.LT.IMAX)                GO TO 4641
C             IF(IDATA(IMAX).GT.JSTCNT)                    GO TO 4641
C             JEN  =      IMAX
C             JSTCNT =IDATA(IMAX)
C 4641      CONTINUE
C 3620      CONTINUE
C-----
0230      B(3)  =1.772*COND(I3)/SQRT(COND(I3+1))  ! Total counts
0231      VAR1  =WORK(I3,I3)*VAWA/(DDMAX-FLOAT(MM3))
0232      VAR2  =WORK(I3+1,I3+1)*VAWA/(DDMAX-FLOAT(MM3))
0233      VAR3  =VAR1/COND(I3)**2 +VAR2/COND(I3+1)**2/4.
0234      B(2)  =B(3)*SQRT(VAR3)  ! Total count error
0235      B(1)  =SQRT(2.773/COND(I3+1))  ! FWHM
0236      B(4)  =0.0  ! Noise
0237      B(5)  =0.0  ! ROB-70 Total count
0238      B(6)  =0.0  ! error
C-----<< ROB-70 Routine >>-----
C          C3N1  =IDATA(ISTRT)
C          C3N2  =IDATA(IEND )
C          DO 4642 INAX =ISTRT ,IEND
C             C3N  =IDATA(IMAX)/(IEND-ISTRT)
C             B(6)  =B(6)  +SQRT(C3N)
C             C3N  =ALOG(C3N1)+(ALOG(C3N2)-ALOG(C3N1))
C             2    /FLOAT(IEND-ISTRT)*(FLOAT(IMAX)-FLOAT(ISTRT))
C             B(5)  =B(5)  +(IDATA(IMAX)-EXP(C3N)) ! Rob-70 T.C.
C 4642      CONTINUE
C-----
C          DO 4643 INAX =JST ,JEN
C-----<< Total & Noise error 1.5*fwhm-ch >>-----
0239      JST  =COND(I3+2)  -1.5*B(1)
0240      JEN  =COND(I3+2)  +1.5*B(1)
0241      DO 4643 INAX =JST ,JEN
0242         B(5)  =B(5) +IDATA(IMAX)
0243 4643      CONTINUE
0244         B(4)  =B(5)  -B(3)
C-----<< Total counts per-centage error >>-----
0245         B(6)  =SQRT(B(5))
0246         TTC  =B(2)
0247         IF(TTC.LE.B(6))  TTC  =B(6)
0248         TTC  =100.0*TTC/B(3)  ! Total %-error
0249         WRITE(3,1200)  (B(I) ,J =1,6)
0250         WRITE(6,6610) I ,COND(I3+2) ,COND(I3),B(1) ,B(3) ,
           2          B(2) ,B(4) ,B(5) ,B(6) ,
           3          TTC
0251 4630 CONTINUE
C          WRITE(6,6620)  TOTAL ,TOTCNT ,TOTERR ,TOTAL1
0252      RETURN
C 6620  FORMAT(//10X,' Total counts & noise ----- ',F20.5/
C          2          10X,' Total counts ----- ',F20.5/
C          3          10X,' Total counts error ----- ',F20.5/

```

FORTRAN-77 V4.1-2  
FTN;1

11:37:32 26-Apr-84  
/F77/TR:BLOCKS/WR

Page 10

```

C      4      10X,' Noise ----- ',F20.5/)
C-----
0253  9910 CONTINUE
0254      KEY      =1
0255      WRITE(6,6920) KEY
0256      RETURN

C-----
0257  6600 FORMAT(//20X,'***** The area under peak & its error *****'/
      2      '0 Start ----> end point ; ',2I6/
      3      ' NO. of peak          ; ',I6/
      4      '0 NO. Peak Channel   Peak counts',
      5      6X,'FWHM   Total counts   error counts',8X,
      6      ' Noise',',', Total & Noise counts   (error)')
C      6      ' Noise',',', BOB-70 (Total counts) (error)')
0258  6610 FORMAT(/I7,2F14.3,F10.4,F15.3,F18.4,F14.3,F24.3,F14.4/
      2      60X,F18.4,'%')
0259  6920 FORMAT('0**** Error this data calculation are abnormal end',I10)
0260  1100 FORMAT(3I10,1PE12.4,3E12.4)
0261  1200 FORMAT(1PE12.5,5F12.5)
0262      END

```